



# Qualification du calcul de l'échauffement photonique dans les réacteurs nucléaires

Simon Ravaux

## ► To cite this version:

Simon Ravaux. Qualification du calcul de l'échauffement photonique dans les réacteurs nucléaires. Autre. Université de Grenoble, 2013. Français. NNT : 2013GRENI009 . tel-00961188

**HAL Id: tel-00961188**

**<https://theses.hal.science/tel-00961188>**

Submitted on 19 Mar 2014

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

## THÈSE

Pour obtenir le grade de

## DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : **Mécanique des fluides, Energétique, Procédés**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

**Simon RAVAUX**

Thèse dirigée par « **Alain SANTAMARINA** » et  
codirigée par « **David BERNARD** »

préparée au sein du **Laboratoire d'Etude de Physique**  
dans l'**École Doctorale I-MEP2 : Ingénierie – Matériaux,**  
**Mécanique, Environnement, Energétique, Procédés,**  
**Production**

# Qualification du Calcul de l'Échauffement Photonique dans les Réacteurs Nucléaires

Thèse soutenue publiquement le **25 mars 2013**,  
devant le jury composé de :

**Madame Elsa MERLE-LUCOTTE**

Professeure à Grenoble INP, Présidente

**Monsieur Paul REUSS**

Professeur à l'INSTN, Rapporteur

**Monsieur Cheick DIOP**

Directeur de recherche au CEA Saclay, Rapporteur

**Monsieur Alain SANTAMARINA**

Directeur de recherche au CEA Cadarache, Directeur de thèse

**Monsieur David BERNARD**

Chercheur au CEA Cadarache, Encadrant

**Madame Laurence VILLATTE**

Chef de section à AREVA-NP (Paris), Membre

**Monsieur David LECARPENTIER**

Ingénieur chercheur à EDF/R&D (Clamart), Membre





## **Remerciements**

Ce travail de thèse s'est déroulé au sein du Laboratoire d'Études de Physique (LEPh) du CEA Cadarache. Je remercie Jean-Paul Grouiller et Cyrille de Saint Jean de m'y avoir accueilli durant ces trois années. Merci également à Alain Santamarina d'avoir accepté de diriger cette thèse.

J'exprime toute ma reconnaissance à tous les membres du jury pour l'intérêt porté à ce travail de thèse, pour le temps passé à relire ce document et pour les remarques constructives apportées.

J'étais encadré au quotidien par David Bernard que je remercie d'abord professionnellement pour toute l'aide qu'il m'a apporté pour la compréhension de mon sujet de thèse, et plus personnellement pour tous les bons moments passés ensemble, notamment les découvertes culinaires telles que la tête de veau. J'espère que tu continueras d'encadrer des thésards.

Merci à Olivier Litaize et Jean Tomasi, mes deux ex-collègues de bureau de début et de fin de thèse pour m'avoir supporté. Désolé d'avoir été si bavard à certains moments. J'en profite également pour remercier Yannick Pénéliou à qui j'ai pris beaucoup de temps en questionnements à propos du code TRIPOLI-4.

J'ai passé de très bons moments avec les thésards du LEPh et je souhaite tous les remercier personnellement. Je pense notamment aux anciens thésards : Philippe, Ansar, Pascal, Adrien et Damien ; aux « presque » docteurs : David, Nicolas, Li, Olivier et Florence et enfin aux « jeunes » : Léonie, Edwin, Pierre, Matthieu et Guillaume. Grâce à eux, ma vie de thésard ne s'est pas limitée aux CEA Cadarache et a été ponctuée de randonnée, jeu de rôle, soirée wii, bateau, baignade...

Je remercie dans son ensemble tous les membres du LEPh qui m'ont toujours accordé de leurs temps pour m'aider lorsque je leur demandais.

Enfin, merci à ma famille pour son soutien et notamment à Roseline qui a dû endurer tout ces allers-retours Paris-Aix en TGV pour venir me voir.





## **Résumé**

Ce travail de thèse répond à un besoin de qualification des outils permettant de calculer les échauffements photoniques dans les réacteurs nucléaires. En effet, la problématique des échauffements  $\gamma$  dans les matériaux de structure a pris de l'importance ces dernières années, notamment pour la sûreté des réacteurs de 3<sup>ème</sup> génération dans lesquels un réflecteur lourd en acier est introduit.

Les photons présents dans le cœur sont tous directement ou indirectement issus des interactions des neutrons avec la matière. Ils sont créés au moment de l'interaction ou en différé par l'intermédiaire de noyaux créés au moment de l'interaction. Par conséquent, le premier axe de travail a été d'effectuer une analyse critique des données de production photonique dans les bibliothèques de données nucléaires standards. La découverte d'omissions dans la bibliothèque JEFF-3.1.1 nous a amené à proposer une méthode de production de nouvelles évaluations contenant de nouveaux spectres d'émission de photon  $\gamma$ . Ces nouvelles évaluations ont ensuite été proposées et en partie acceptées pour la nouvelle version de la bibliothèque JEFF.

Il existe deux codes de transport de particules développés au CEA : TRIPOLI4 et APOLLO2. Le deuxième axe de travail a été de qualifier ces deux codes. Pour cela, nous avons interprété les mesures d'échauffement  $\gamma$  effectuées dans le cadre du programme expérimental PERLE. Des détecteurs thermoluminescents (TLD) ont été introduits dans un réflecteur lourd en acier entourant un réseau de crayons combustibles. Nous avons dû proposer un schéma de calcul spécifique aux deux codes afin de calculer la réponse des TLD.

Les comparaisons calcul-mesure ont montré que TRIPOLI4 permettait de correctement estimer l'échauffement dans le réflecteur relativement à l'échauffement dans la zone fissile. En effet, les écarts calcul-mesure sont inférieurs à l'incertitude expérimentale à  $1\sigma$ . Pour le calcul APOLLO2, nous avons tout d'abord commencé par une phase de validation par rapport à TRIPOLI4 afin d'estimer les biais liés aux approximations imposées par le traitement déterministe du transport des particules. Après cette phase de validation, nous avons pu montrer qu'APOLLO2, comme TRIPOLI4, permettait d'estimer correctement l'échauffement dans le réflecteur avec des écarts calcul-mesure comparables à l'incertitude expérimentale.

## **Abstract**

During the last few years, the  $\gamma$ -heating issue has gained in stature, mainly for the safety of the 3<sup>rd</sup>-generation reactors in which a stainless steel reflector is inserted. The purpose of this work is the qualification of the needed tools for calculation of the  $\gamma$ -heating in the nuclear reactors.

In a nuclear reactor, all the photons are directly or indirectly produced by the neutron-matter interactions. Thus, the first phase of this work is a critical analysis of the photon production data in the standard nuclear data library. New evaluations have been proposed to the next version of the JEFF library after that some omissions have been found. They have partly been accepted for JEFF-3.2.

Two particle-transport codes are currently developed in the CEA: the deterministic code APOLLO2 and the Monte Carlo code TRIPOLI4. The second part of this work is the qualification of both these codes by interpreting an integral experiment called PERLE. The experimental set-up is made by a LWR pin assembly surrounded by a stainless steel reflector in which the  $\gamma$  heating is measured by Thermo-luminescent Detector (TLD). A calculation scheme has been proposed for both APOLLO2 and TRIPOLI4 in order to calculate the TLD's responses.

Comparisons between calculations and measurements have shown that TRIPOLI4 gives a satisfactory estimation of the  $\gamma$  heating in the reflector. These discrepancies are within the experimental  $1\sigma$  uncertainty. Before the qualification, APOLLO2 has been previously validated against TRIPOLI4 reference calculation. This validation gives an estimation of the bias due to the deterministic approximations of the transport equation resolution. The qualification has shown that the discrepancies between APOLLO2 predictions and TLD's measurements are in the same range as experimental uncertainties.

## **Table des matières**

<b>Remerciements</b>	<b><i>i</i></b>
<b>Résumé</b>	<b><i>iii</i></b>
<b>Abstract</b>	<b><i>iv</i></b>
<b>Table des matières</b>	<b><i>v</i></b>
<b>Introduction</b>	<b><i>1</i></b>
<b>Chapitre I Introduction au transport de particules dans un réacteur nucléaire</b>	<b><i>3</i></b>
<b>I.1 Synthèse des particules présentes dans un réacteur nucléaire</b>	<b><i>3</i></b>
I.1.i Le neutron	<i>3</i>
I.1.ii Le photon	<i>4</i>
I.1.iii L'électron	<i>5</i>
I.1.iv Autres particules	<i>5</i>
<b>I.2 Les sections efficaces</b>	<b><i>6</i></b>
<b>I.3 Simulation du transport de particules neutres</b>	<b><i>8</i></b>
I.3.i L'équation du transport des particules neutres	<i>8</i>
I.3.ii Résolution déterministe de l'équation du transport	<i>10</i>
I.3.iii Résolution Monte Carlo de l'équation de transport	<i>13</i>
I.3.iv Codes de résolution du transport	<i>14</i>
<b>I.4 Quelques notions sur le transport des électrons</b>	<b><i>15</i></b>
<b>Chapitre II Vieillessement des matériaux spécifiques des réacteurs nucléaires</b>	<b><i>17</i></b>
<b>II.1 Approche microscopique du vieillissement des matériaux sous irradiation</b>	<b><i>17</i></b>
II.1.i Rappel de cristallographie	<i>17</i>
II.1.ii Création de défauts ponctuels par irradiation	<i>18</i>
<b>II.2 Effet macroscopique du vieillissement des matériaux</b>	<b><i>22</i></b>
II.2.i Corrosion de la gaine en zircaloy	<i>22</i>
II.2.ii Fragilisation sous irradiation de la cuve en acier	<i>22</i>
<b>II.3 Conclusion</b>	<b><i>23</i></b>
<b>Chapitre III Échauffement local dans les matériaux spécifiques des réacteurs nucléaires</b>	<b><i>25</i></b>
<b>III.1 Rappel sur les réactions nucléaires</b>	<b><i>25</i></b>
<b>III.2 Notion de KERMA</b>	<b><i>26</i></b>
<b>III.3 Les échauffements neutroniques</b>	<b><i>27</i></b>
III.3.i Différentes expressions du KERMA neutron	<i>27</i>
III.3.ii La diffusion élastique	<i>28</i>
III.3.iii La diffusion inélastique	<i>29</i>
III.3.iv La capture radiative	<i>29</i>
III.3.v La fission	<i>30</i>
<b>III.4 Les échauffements photoniques</b>	<b><i>31</i></b>
III.4.i Les interactions photon-matière	<i>31</i>
III.4.ii Bibliothèque de stockage des facteurs de KERMA photonique	<i>39</i>
III.4.iii Limitation du KERMA pour l'estimation de l'énergie déposée localement, notion de dose déposée	<i>40</i>
<b>III.5 Composantes neutroniques et photoniques de l'échauffement dans un réacteur nucléaire</b>	<b><i>43</i></b>

III.5.i	Echauffements relatifs dans une cellule d'un réseau de crayon combustible	44
III.5.ii	Echauffements relatifs dans une maquette critique	44
III.5.iii	Conclusion	46
<b>Chapitre IV Analyse critique des données nucléaires disponibles dans les bibliothèques pour les calculs d'échauffement photonique</b>		<b>47</b>
<b>IV.1</b>	<b>Rappel sur le format ENDF</b>	<b>47</b>
<b>IV.2</b>	<b>La diffusion neutronique inélastique</b>	<b>49</b>
IV.2.i	Principe de la diffusion inélastique	49
IV.2.ii	Etat des lieux des spectres $\gamma$ de diffusion inélastique dans JEFF-3.1.1 et dans les autres bibliothèques	50
<b>IV.3</b>	<b>La fission induite par neutron</b>	<b>51</b>
IV.3.i	Etats des lieux des mesures de spectre de $\gamma$ prompts de fission	51
IV.3.ii	Les données nucléaires dans les bibliothèques	52
IV.3.iii	$\gamma$ retardés de fission	56
<b>IV.4</b>	<b>La capture radiative</b>	<b>58</b>
IV.4.i	Principe de la capture radiative	58
IV.4.ii	Les chaleurs de réactions dans JEFF-3.1.1	59
IV.4.iii	Etat des lieux des spectres de capture radiative dans JEFF-3.1.1 et les autres bibliothèques	59
<b>IV.5</b>	<b>Comparaison des différentes sources de photons dans un réacteur</b>	<b>61</b>
IV.5.i	Estimation des sources de photons dans un cœur de réacteur nucléaire	61
IV.5.ii	Comparaison des sources de photons dans le réflecteur en acier d'un réacteur nucléaire	61
<b>IV.6</b>	<b>Conclusion sur les productions photoniques dans les bibliothèques de données nucléaires</b>	<b>65</b>
<b>Chapitre V Production de nouveaux spectres gamma de capture radiative du neutron pour JEFF3</b>		<b>66</b>
<b>V.1</b>	<b>Les mesures de spectres gamma de capture radiative</b>	<b>66</b>
V.1.i	ENSDF : une bibliothèque de schéma de niveaux	66
V.1.ii	EGAF : une bibliothèque de mesure des photons gamma de capture radiative	68
<b>V.2</b>	<b>Modèles associés à la simulation de la cascade gamma</b>	<b>69</b>
V.2.i	Le modèle du noyau composé	70
V.2.ii	Le modèle de décroissance de Hauser-Feshbach	73
V.2.iii	Modèles de fonction de force et de densité de niveaux	74
V.2.iv	Quelques codes de simulation des réactions nucléaires	76
<b>V.3</b>	<b>Les nouvelles évaluations</b>	<b>77</b>
V.3.i	Production de nouvelles évaluations combinant le code TALYS et les évaluations EGAF	77
V.3.ii	Limitation de cette méthode de production	79
V.3.iii	Comparaison des nouveaux spectres avec les autres évaluations	79
V.3.iv	Influence des nouveaux spectres sur les échauffements photoniques.	83
<b>Chapitre VI Le programme expérimental PERLE</b>		<b>86</b>
<b>VI.1</b>	<b>Introduction d'un réflecteur lourd en acier dans les réacteurs de troisième génération</b>	<b>86</b>
<b>VI.2</b>	<b>Caractéristiques du cœur PERLE</b>	<b>88</b>
<b>VI.3</b>	<b>Mesures de l'échauffement photonique dans le cœur PERLE</b>	<b>90</b>
VI.3.i	Déroulement des mesures d'échauffement $\gamma$ dans PERLE	90
VI.3.ii	Principes des mesures par détecteurs thermo-luminescent	92
<b>VI.4</b>	<b>Interprétation des mesures par TLD dans PERLE</b>	<b>96</b>
VI.4.i	La problématique de l'irradiation des TLD en champ mixte neutron-photon	96

VI.4.ii	La problématique de la correction de cavité	97
---------	---	----

## **Chapitre VII Qualification du code TRIPOLI4 par interprétation des mesures PERLE 100**

<b>VII.1</b>	<b>Méthodologie d'interprétation des mesures par TLD</b>	<b>100</b>
VII.1.i	Le calcul de la composante prompte	100
VII.1.ii	Le calcul de la composante retardée	106
VII.1.iii	Calcul de la composante neutron	112
VII.1.iv	Normalisation à la puissance et à la durée d'irradiation	113
<b>VII.2</b>	<b>Interprétation des mesures dans la configuration « PERLE homogène »</b>	<b>114</b>
VII.2.i	Dose déposée dans les TLD lors du calcul en une étape	114
VII.2.ii	Interprétation des mesures par la méthode du calcul en 1 étape	117
VII.2.iii	Interprétation des mesures par la méthode du calcul en deux étapes avec géométrie simplifiée	120
VII.2.iv	Interprétation des mesures avec la méthode du calcul en deux étapes avec stockage des particules	124
<b>VII.3</b>	<b>Interprétation des mesures dans la configuration « PERLE trou d'eau »</b>	<b>126</b>
VII.3.i	Dose absolue déposée dans les TLD	127
VII.3.ii	Comparaison calcul-mesure	130
<b>VII.4</b>	<b>Dose déposée dans les matériaux du réacteur PERLE</b>	<b>131</b>
VII.4.i	Résultats obtenus dans la configuration « PERLE homogène »	131
VII.4.ii	Résultats obtenus dans la configuration « PERLE trou d'eau »	134
<b>VII.5</b>	<b>Réévaluation de la dose photon prompte avec les nouvelles évaluations du fer</b>	<b>136</b>
<b>VII.6</b>	<b>Conclusions sur la qualification de TRIPOLI4 et de la bibliothèque JEFF-</b>	<b>137</b>

3.1.1

## **Chapitre VIII Validation et qualification du code APOLLO2 139**

<b>VIII.1</b>	<b>Outils nécessaires au calcul de l'échauffement <math>\gamma</math> avec APOLLO2</b>	<b>139</b>
VIII.1.i	Données nucléaires et atomiques utilisées	139
VIII.1.ii	Schéma de calcul déterministe de transport photonique	142
<b>VIII.2</b>	<b>VALIDATION D'APOLLO2.8-3</b>	<b>143</b>
VIII.2.i	Méthodologie de validation : source et transport photonique	143
VIII.2.ii	Cas cellule en milieu infini	143
VIII.2.iii	Cas PERLE en 2 dimensions radiales	147
VIII.2.iv	Validation du calcul de la composante $\gamma$ retardée	161
<b>VIII.3</b>	<b>QUALIFICATION D'APOLLO2.8-3 : INTERPRETATION DE PERLE</b>	<b>161</b>
VIII.3.i	Rappel des corrections de cavité et de passage dose $\rightarrow$ KERMA des TLD	161
VIII.3.ii	Estimation de la correction des effets 3D par TRIPOLI4.8	163
VIII.3.iii	Qualification APOLLO2.8 des KERMA-photon dans le cas d'une faible irradiation (PERLE)	166

<b>VIII.4</b>	<b>CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS</b>	<b>168</b>
---------------	---------------------------------------	------------

## **Conclusions et perspectives 171**

## **Annexe A Etat des lieux des sources photoniques contenues dans JEFF-3.1 175**

## **Annexe B Nouveaux spectres de capture radiative insérés dans les nouvelles évaluations 183**

## **Annexe C Enchaînement des modules APOLLO2 pour le calcul de l'échauffement $\gamma$ 189**

## **Annexe D Validation du calcul P5 avec le code APOLLO2 193**

<i>Annexe E Publications</i>	195
<i>Bibliographie</i>	213
<i>Liste des figures</i>	221
<i>Liste des tableaux</i>	225

## **Introduction**

Le fonctionnement des réacteurs nucléaires génère un très grand nombre de particules. Ces particules peuvent être :

- Des photons :  $\gamma$ , X, Bremsstrahlung,
- Des particules légères : électron ou positon
- Des particules lourdes : neutron, proton,  $\alpha$ , ion.

La plage énergétique de ces particules est très étendue. Elle va de quelques meV à plusieurs dizaines de MeV. Après leurs émissions, toutes ces particules se transportent et déposent une partie de leurs énergies par des interactions successives avec les noyaux et atomes constituant les matériaux des réacteurs nucléaires. Ces dépôts d'énergie successifs créent ainsi des échauffements locaux qui se traduiront par une élévation de la température des matériaux. Les propriétés mécaniques des matériaux dépendant de la température, l'estimation de ces échauffements est donc primordiale pour le dimensionnement et le fonctionnement des réacteurs nucléaires.

La presque totalité de l'énergie déposée dans l'ensemble d'un réacteur nucléaire est produite lors de la fission du combustible induite par les neutrons. Ainsi, pour estimer la puissance d'un réacteur nucléaire, il n'est pas utile de prendre en compte les dépôts d'énergie liés aux autres particules. Cependant, localement, la part des neutrons dans l'échauffement devient négligeable dans les matériaux de structure. L'énergie déposée par les photons devient alors la principale source de chaleur.

Dans certains concepts de réacteur de 3<sup>ème</sup> génération, un réflecteur lourd en acier a été introduit autour de la zone fissile afin d'augmenter la réactivité. Dans ce réflecteur, la principale source d'échauffement est liée aux photons. Ce baffle étant situé à proximité direct des crayons, il est indispensable de s'assurer que la déformation du réflecteur due à la dilatation thermique sera suffisamment faible pour assurer le fonctionnement du réacteur dans les marges de sûreté. Il est donc indispensable de posséder des outils performants permettant d'estimer l'échauffement photonique dans les matériaux de structure.

Parmi ces outils, nous pouvons lister :

- Une bibliothèque de transport neutron,
- Une bibliothèque de production de photons générés par les réactions neutroniques,
- Une bibliothèque de transport photon et des particules secondaires (électrons et positons),
- Un code de transport de particule permettant de coupler le transport des neutrons et des photons.

Tous ces outils sont d'ores et déjà disponibles. La bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1 contient les sections efficaces nécessaires au transport neutronique et production de photon. La bibliothèque EPDL97 contient les sections efficaces nécessaires au transport photonique. Le transport des neutrons et des photons ainsi que la génération des sources de photons sont assurés par le code déterministe APOLLO2 ou par le code Monte Carlo TRIPOLI4. A l'heure actuelle, tous ces outils ont été peu utilisés dans le cadre de problématiques liées au transport des photons et au calcul des échauffements. Par conséquent, ils n'ont presque pas été qualifiés.

L'objectif de cette thèse est donc d'apporter des éléments de qualification de ces différents outils. Des mesures d'échauffements photoniques ont été effectuées lors d'une



expérience critique nommée PERLE. Elles constituent ainsi une base de qualification pour les calculs d'échauffements photoniques.

Ce travail de thèse a été divisé en trois parties principales :

- Vérification et amélioration des données nucléaires de production photonique contenue dans la bibliothèque JEFF-3.1.1
- Qualification du code TRIPOLI4 par interprétation des mesures effectuées dans le cœur PERLE
- Validation et qualification du code APOLLO2 par interprétation des mesures effectuées dans le cœur PERLE.

## **Chapitre I      Introduction au transport de particules dans un réacteur nucléaire**

Le but de ce chapitre est de rappeler les éléments de physique nécessaire à la compréhension du fonctionnement d'un réacteur nucléaire. La majorité des notions qui seront abordées sont décrites dans l'ouvrage de référence de Paul Reuss [1].

### **I.1      Synthèse des particules présentes dans un réacteur nucléaire**

Un réacteur nucléaire en fonctionnement, génère et absorbe à chaque instant un très grand nombre de particules. Ces particules peuvent être divisées en plusieurs catégories dont chacune a une influence sur les états macroscopiques du réacteur (température, criticité, vieillissement ...). On peut classer les particules présentes dans un réacteur nucléaire en 4 catégories :

- Les photons
- Les neutrons
- Les particules chargées légères (électrons et positons)
- Les particules chargées lourdes (protons, alpha, ions, ...)

Des neutrinos et anti-neutrinos sont également produits mais n'interagissent pas avec les matériaux présents dans un réacteur.

#### **I.1.i      Le neutron**

Historiquement, les existences du proton et du neutron ont été respectivement mises en évidence par Rutherford en 1919 et son ancien étudiant Chadwick en 1932. Ces deux particules sont à l'état naturel les constituants des noyaux atomiques (les nucléons). Elles subissent toutes les deux l'interaction nucléaire forte qui est une force de très faible portée permettant de maintenir la cohésion des nucléons dans les noyaux atomiques. Le proton étant une particule chargée, il subit également l'interaction électromagnétique, ce qui n'est pas le cas du neutron qui lui est neutre. Dans les noyaux atomiques, les nucléons sont dans un état lié auquel on associe une énergie négative. Cette énergie correspond à celle qu'il faut fournir pour que le nucléon puisse se libérer de l'interaction forte qui le lie aux autres nucléons du noyau.

Le fonctionnement d'un réacteur nucléaire est presque uniquement basé sur le maintien artificiel (car presque jamais observé dans la nature) d'un niveau de population de neutrons non liés (ou libres) à peu près constant. Ces neutrons libres peuvent ainsi se déplacer dans le réacteur en obéissant à certaines lois liées aux interactions avec la matière. Ces lois seront détaillées plus tard dans ce manuscrit. Comme le neutron ne subit que l'interaction nucléaire forte qui est une force de courte portée, tant qu'il ne passe pas à proximité d'un noyau atomique, sa trajectoire n'est pas modifiée. Ainsi, la taille des noyaux (de l'ordre de  $10^{-15}$  m) étant très faible par rapport à l'espace occupé par un atome (de l'ordre de  $10^{-10}$  m), les neutrons peuvent conserver une trajectoire rectiligne sur de grandes distances (elles peuvent atteindre des longueurs de l'ordre de plusieurs centimètres).

Dans un réacteur nucléaire, le trajet d'un neutron libre se termine presque toujours par son absorption par l'un des noyaux composant l'un des milieux traversés. Le neutron ainsi absorbé redevient un neutron lié. On peut noter que le neutron libre est un élément radioactif et qu'il peut spontanément se transformer en proton. Cependant la durée de vie moyenne d'un neutron avant désintégration ( $\sim 15$  minutes) est beaucoup plus longue que sa durée de vie moyenne avant absorption ( $\sim 2.5 \cdot 10^{-5}$  secondes dans un réacteur de type REP). Ce phénomène est donc pratiquement inexistant dans un réacteur nucléaire.

L'absorption d'un neutron par certains noyaux dits fissiles tels que l' $^{235}\text{U}$  conduit au dégagement d'une grande quantité d'énergie ainsi qu'à la production de quelques nouveaux neutrons. Ces nouveaux neutrons pourront eux-mêmes réagir avec d'autres noyaux fissiles et reproduire ainsi la réaction en chaîne. C'est le principe de base de fonctionnement d'un réacteur nucléaire pour produire de l'énergie en continu.

Le bon fonctionnement d'un réacteur nucléaire consiste donc à garder constante la quantité de neutrons libres en assurant un équilibre entre le nombre de neutrons créés et le nombre neutrons absorbés à chaque instant. Cet équilibre est décrit par la quantité notée  $k_{\text{eff}}$ . En condition de fonctionnement normal, sa valeur doit être égale à 1. Au-delà de 1, la population neutronique et l'énergie dégagée augmente. Le réacteur est alors sur-critique. En-dessous de 1, le réacteur est sous-critique.

### I.1.ii Le photon

Le photon est la particule associée aux ondes électromagnétiques. Historiquement, son concept fut développé par Einstein entre 1905 et 1917 afin d'expliquer certaines observations expérimentales qui étaient jusqu'alors incomprises avec les modèles purement ondulatoires appliqués à l'époque. Le photon est une particule sans masse se déplaçant à la vitesse de la lumière dans le vide<sup>1</sup>. Malgré l'absence de masse, cette particule emporte avec elle une énergie qui est définie par sa longueur d'onde  $\lambda$  ou sa fréquence  $\nu$  ainsi que par la constante de Planck  $h$ <sup>2</sup>.

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

On peut distinguer au moins quatre catégories de photons :

- Les photons  $\gamma$  qui sont créés lors de la désexcitation des noyaux atomiques. L'énergie de ces photons varie en général du keV<sup>3</sup> jusqu'à la dizaine de MeV.
- Les photons X qui sont émis lors de la relaxation du cortège électronique d'un atome. Leurs énergies varient de quelques eV jusqu'à une centaine de keV.
- Les photons de Brehmsstrahlung qui sont produits par les particules chargées légères (électron et positon) lors de leurs interactions avec un champ magnétique (notamment celui d'un atome). L'énergie de ces photons dépend de celle des particules chargées. Certains accélérateurs de particules tels que l'installation SAPHIR[2] au CEA Saclay permettent de créer des photons de Brehmsstrahlung de plusieurs dizaines de MeV.
- Les photons d'annihilation presque toujours créés par paire lors de l'annihilation d'un positon avec un électron. Ces photons ont une énergie de 511 keV correspondant à l'énergie de masse au repos d'un électron.

Toutes ces notions seront expliquées plus en détail dans la suite du document, notamment dans le chapitre 3.

Dans un réacteur nucléaire, tous ces types de photons sont présents. Cependant, la majorité de l'énergie photonique est emportée par les photons  $\gamma$ . Les photons, tout comme les neutrons, sont des particules neutres. Ils subissent cependant des interactions de

---

<sup>1</sup>  $c = 3.10^8 \text{ m.s}^{-1}$

<sup>2</sup>  $h = 6.626.10^{-34} \text{ J.s}^{-1}$

<sup>3</sup> Pour rappel,  $1\text{eV} = 1.6.10^{-19} \text{ J}$

longues portées. Ils peuvent tout de même parcourir de longues distances et déposer leurs énergies loin de leurs sources d'émission. Bien que le pilotage des réacteurs nucléaires soit presque uniquement basé sur la population neutronique, certaines problématiques propres à la sûreté nucléaire nécessite une étude rigoureuse des trajectoires empruntées par les photons depuis leurs créations jusqu'à leurs absorptions.

### I.1.iii L'électron

Dans la nature, l'électron est principalement présent dans la matière sous sa forme liée. C'est-à-dire qu'il gravite autour du noyau atomique dans ce que l'on nomme le cortège électronique de l'atome. Cependant, on trouve également à l'état naturel de nombreux électrons libres dans la matière. C'est notamment le cas des métaux dans lesquels le mouvement continu des électrons assure la cohésion des atomes les uns avec les autres ainsi que la conduction de l'électricité. Les électrons peuvent également être libérés en acquérant suffisamment d'énergie. C'est notamment le cas lorsqu'un photon entre en collision avec un électron lié et lui transmet toute ou une partie de son énergie. Dans un réacteur nucléaire, la présence permanente de photon, conduit à la production et à la présence permanente de nombreux électrons libres.

Contrairement aux particules neutres décrites précédemment, les électrons libres subissent en permanence les forces de longue portée créées par les champs coulombiens des atomes environnants. Entre le moment de leurs expulsions d'un cortège électronique jusqu'à la perte totale de leurs énergies cinétiques, les électrons parcourent donc de très faibles distances en comparaison des neutrons et des photons. C'est pourquoi en général, on considère que les électrons ne se transportent pas et disparaissent à l'endroit même où ils ont été générés<sup>4</sup>. La maîtrise des conditions de fonctionnement d'un réacteur ne nécessite donc pas de simuler leurs trajets.

### I.1.iv Autres particules

D'autres particules chargées sont produites dans les réacteurs nucléaires : protons, deutons, particules  $\alpha$ , ions lourds, ... Comme les électrons, ces particules subissent en permanence les effets du champ électromagnétique des atomes. Etant plus lourdes que les électrons, à énergies cinétiques égales, elles acquièrent une vitesse beaucoup plus faible que ceux-ci. La distance qu'elles parcourent avant leur arrêt est donc encore plus faible que celle des électrons. Par conséquent, comme pour les électrons il n'est pas utile de simuler le transport de ces particules pour connaître l'état d'un réacteur en fonctionnement.

Cependant, sur le long terme, c'est-à-dire le temps d'un cycle de chargement d'un réacteur nucléaire<sup>5</sup>, certaines de ces particules peuvent entrer en compte dans les problématiques de sûreté. C'est notamment le cas des particules  $\alpha$ . Celles qui ont réussi à pénétrer dans la gaine des crayons combustibles altèrent ses propriétés mécaniques. Pour pouvoir estimer cet effet, il faut donc connaître le nombre de particules  $\alpha$  transportées du combustible vers la gaine.

Les ions lourds induisent plusieurs effets non liés à leurs transports. En effet une partie des ions lourds<sup>6</sup> produits dans un réacteur est radioactive. Cela signifie qu'ils peuvent se désintégrer spontanément en se transformant en un autre noyau. Le temps de vie moyen avant désintégration dépend du noyau et peut varier entre quelques ms et plusieurs années. Cette transmutation s'accompagne principalement de rayonnements  $\beta$  (électron) et  $\gamma$ . La

---

<sup>4</sup> C'est-à-dire au lieu de collision entre un photon et un atome

<sup>5</sup> Environ 3 ans

<sup>6</sup> On utilise ici abusivement le terme d'ion lourd bien que ceux-ci récupèrent très vite la totalité de leurs cortèges électroniques dans le réacteur

somme des énergies émises lors de la désintégration de l'ensemble des ions lourds n'est pas négligeable vis-à-vis de l'énergie totale émise dans un réacteur nucléaire. De plus, lorsque le réacteur est à l'arrêt, cette énergie devient la seule produite. Elle représente ce que l'on nomme la puissance résiduelle.

Un second effet qui est lié aux ions lourds se répercute sur le transport des neutrons. En effet, la génération d'ions lourds modifie la composition des matériaux d'un réacteur nucléaire. Par conséquent, le rapport entre la part des neutrons entraînant une fission et celle qui est capturée varie dans le temps au fur et à mesure de l'apparition de nouveaux ions lourds. Cela impacte directement la valeur du  $k_{\text{eff}}$  qui diminue avec le temps. En réalité, des mécanismes propres au pilotage des réacteurs nucléaires permettent de contrebalancer cette perte de réactivité afin de maintenir le réacteur dans un état critique.

## 1.2 Les sections efficaces

Les interactions particules-matières ne peuvent pas être traitées de manière déterministe. Cela signifie que l'on ne peut pas prévoir un état final à partir d'un état initial donné. Par exemple, lorsqu'un neutron d'énergie cinétique  $E$  entre en collision avec un noyau d' $^{235}\text{U}$ , on ne sait pas si la réaction résultante sera une absorption ou une fission. Par contre, pour une quantité suffisamment grande de neutrons entrant en collision avec un noyau d' $^{235}\text{U}$ , nous connaissons la fréquence moyenne d'occurrence de chaque réaction. Ces fréquences sont les probabilités d'interaction. Les sections efficaces sont des outils permettant de quantifier ces probabilités.

Pour introduire la notion de section efficace, nous considérons en premier lieu un flux monocinétique de particules que l'on note  $\Phi$  en  $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ . Celui-ci est dirigé vers une surface d'épaisseur 1 atome de densité  $N$  en  $\text{atome}.\text{cm}^{-2}$ . Le nombre de réaction  $\tau$  en  $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$  peut s'écrire :

$$\tau = N\sigma_{\text{tot}}\phi$$

$\sigma_{\text{tot}}$  est la section efficace microscopique totale et correspond au nombre d'évènements observés sur le nombre total<sup>7</sup> d'évènements potentiels. Elle est le plus souvent exprimée en barn (noté b), soit  $10^{-24} \text{ cm}^2$ . Cette quantité correspond à l'ordre de grandeur de la section géométrique d'un noyau atomique (quelques  $\text{fm}^2$ ). Les valeurs prises par les sections efficaces peuvent cependant varier de quelques millibarns à plusieurs centaines de milliers de barns en fonction du noyau, de l'énergie de la particule incidente et du type de réaction considéré. Cela correspond donc à des surfaces dont la taille est très supérieure à la section géométrique d'un noyau atomique.

En généralisant cette notion à des volumes  $M$  composés de plusieurs noyaux différents, on définit la section efficace macroscopique  $\Sigma$  exprimée en  $\text{cm}^{-1}$ .

$$\Sigma_{\text{tot}} = \sum_i N_i \sigma_i$$

$N_i$  et  $\sigma_{\text{tot}}$  correspondent à la concentration et à la section efficace du noyau  $i$ . On peut remarquer que  $L=1/\Sigma$  a la dimension d'une longueur. Elle correspond au libre parcours moyen de la particule incidente dans le milieu  $M$  avant collision (la distance moyenne parcourue entre 2 collisions).

Il existe une multitude d'interactions possibles entre un neutron et un noyau. Nous en avons introduites certaines comme la fission dans le paragraphe précédent. Chaque interaction possède sa propre section efficace. La section efficace totale décrite

---

<sup>7</sup> Cela signifie que toutes les particules incidentes ont interagi avec les noyaux cibles

précédemment est la somme des sections efficaces partielles de chaque interaction nucléaire.

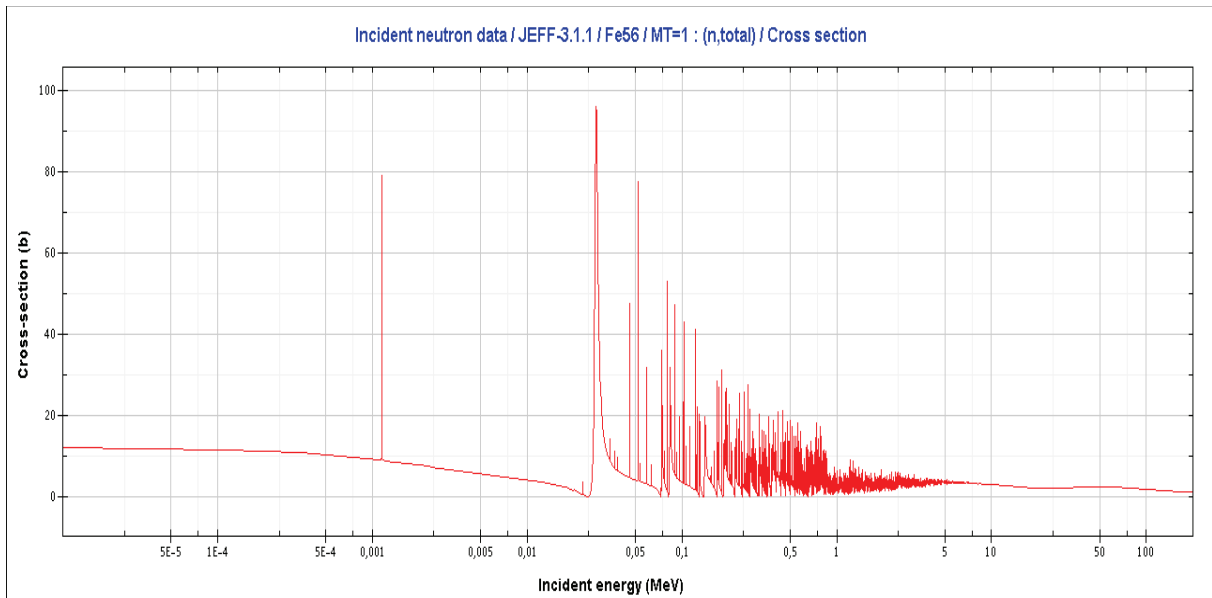
$$\sigma_{tot} = \sum_i \sigma_i$$

Les sections efficaces varient en fonction de l'énergie cinétique des particules incidentes. Dans la littérature, elles sont donc en général tabulées en fonction de cette énergie cinétique. Elles sont ainsi représentées ainsi sous la forme de courbes  $\sigma=f(E_i)$  avec  $E_i$  l'énergie de la particule incidente.

Dans le cas des interactions des neutrons avec la matière, nous distinguons 4 domaines énergétiques distincts dans la courbe représentative de la section efficace. Les bornes énergétiques de chacun de ces domaines dépendent du noyau considéré. On distingue :

- Le domaine thermique ( $E_i < 1\text{eV}$ ) dans lequel la section efficace évolue proportionnellement à  $E_i^{-1/2}$ ,
- Le domaine des résonances résolues (jusqu'à quelques centaines de keV pour le  $^{56}\text{Fe}$ , jusqu'à seulement quelques dizaines de keV pour l' $^{238}\text{U}$ ) dans lequel la valeur de la section efficace présente des pics (c'est-à-dire des variations brusques) appelés résonance,
- Le domaine non résolu (allant jusqu'à quelques centaines de keV pour l' $^{238}\text{U}$ ) dans lequel les résonances sont toujours présentes mais trop peu espacées pour pouvoir être identifiées individuellement,
- Le domaine du continuum dans lequel les résonances sont si peu espacées qu'elles se recouvrent mutuellement et s'annihilent (certains phénomènes non résonants sont également présents à partir de ces énergies).

Nous pouvons voir ces quatre domaines sur la section efficace totale du  $^{56}\text{Fe}$  tracée sur la Figure I-1.



**Figure I-1 Section efficace totale du  $^{56}\text{Fe}$**

Les sections efficaces peuvent également prendre en compte d'autres paramètres en plus de l'énergie du neutron incident. Par exemple, certaines interactions produisent des particules secondaires. L'angle entre le neutron incident et la particule émise ainsi que

l'énergie de la particule émise sont également des paramètres pouvant être pris en compte dans la représentation des sections efficaces.

Toutes les valeurs prises par les sections efficaces en fonction de l'énergie cinétique du neutron, du noyau et du type de réaction sont disponibles dans ce que l'on appelle les bibliothèques de données nucléaires<sup>8</sup>. Une partie des sections efficaces sont tabulées. Dans ce cas, elles sont dites ponctuelles car elles donnent les valeurs exactes de la section efficace en différents points d'énergie neutronique  $E_n$  données. Les phénomènes résonants sont également paramétrisés. En effet, certaines quantités propres aux résonances (hauteur, largeur à mi-hauteur) dépendent bien évidemment du noyau mais également de paramètres qui lui sont extérieurs tels que la température du milieu. Il n'est donc pas possible de tabuler rigoureusement les valeurs prises par la section efficace au niveau des résonances. Les bibliothèques ne contiennent donc que les paramètres de résonance propres aux noyaux qui permettent ensuite de reconstruire la section efficace dans le domaine des résonances en fonction des paramètres extérieurs propres au problème considéré. Les trois principales bibliothèques existantes sont :

- JEFF[3] qui est développée conjointement entre les différents pays de l'Union Européenne,
- JENDL[4] qui est développée au Japon,
- ENDF/B[5] qui est développée aux Etats-Unis.

La Chine et la Russie développent elles aussi leurs propres bibliothèques de données nucléaires qui s'appellent CENDL et BROND. Cependant, à l'heure actuelle, la quantité d'information disponible dans ces 2 bibliothèques reste très inférieure à celle contenue dans les bibliothèques de référence.

Ces bibliothèques ne contiennent pas que les sections efficaces neutroniques. On y trouve également les spectres d'émission des particules secondaires produites lors des réactions nucléaires (dont les productions photoniques). Elles contiennent également les données liées à la radioactivité des noyaux. Les sections efficaces d'interaction des photons avec la matière qui sont elles-mêmes tirées d'une bibliothèque nommée EPDL97[23] sont également présentes. Nous reviendrons sur la bibliothèque EPDL97 dans le chapitre 3.

### **I.3 Simulation du transport de particules neutres**

#### **I.3.i L'équation du transport des particules neutres**

Dans la première section de ce chapitre, nous avons vu que parmi les nombreuses particules produites dans un réacteur nucléaire, seul le transport des neutrons et des photons influait sur ses paramètres de fonctionnement. Ces deux particules sont des particules neutres et obéissent à la même loi de transport. Dans cette sous-partie, nous traiterons uniquement l'équation du transport liée aux neutrons mais la plupart des remarques qui seront faites s'appliqueront tout aussi bien au transport des photons.

Afin de décrire le transport des neutrons, on utilise communément une quantité appelée flux neutronique. Elle est obtenue à partir du produit de la densité de neutrons  $n$  et de leurs vitesses  $v$  :

$$\phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = v.n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$$

Cette quantité, multipliée par les sections efficaces macroscopiques correspond aux taux de réactions, c'est-à-dire au nombre d'occurrence d'une réaction par unité de volume et

---

<sup>8</sup> Ces bibliothèques contiennent beaucoup d'autres informations notamment sur les spectres en angle-énergie des particules émises durant les réactions nucléaires



par unité de temps. Par exemple, pour la réaction  $i$  dont la section efficace macroscopique partielle est  $\Sigma_i$ , le taux de réaction prendra pour expression :

$$\tau_i = \Sigma_i \cdot \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$$

Le flux neutron varie en fonction du temps  $t$ , de l'énergie<sup>9</sup>  $v$ , de la direction  $\Omega$  et de la position dans l'espace  $r$ . Ses variations selon ces 4 paramètres obéissent à l'équation du transport qui est aussi appelée équation de Boltzmann. Sous sa forme intégral-différentielle<sup>10</sup>, l'équation de Boltzmann prend pour expression :

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = & \\ & - \text{div}[\vec{\Omega} \cdot \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)] \\ & - \Sigma_t(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) \cdot \phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) \\ & + \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, (v', \vec{\Omega}') \rightarrow (v, \vec{\Omega}), t) \cdot \phi(\vec{r}, v', \vec{\Omega}', t) \\ & + S(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) \end{aligned}$$

Cette équation qui néglige les termes d'interactions neutron-neutron se compose de 5 termes :

- Le premier terme, dit de bilan neutronique, est presque toujours négligé car le flux neutronique varie très lentement avec le temps. Il est ainsi considéré comme stationnaire sauf pour étudier des problèmes particuliers tels que la cinétique neutronique.
- Le second terme dit de fuite traduit le bilan entrée/sortie des neutrons dans un volume élémentaire  $dr^3$  durant un intervalle de temps  $dt$ .
- Le troisième terme dit de disparition par choc correspond aux disparitions des neutrons par choc avec les noyaux du milieu environnant. Ces chocs peuvent conduire à un changement d'état du neutron (nouvelle énergie, direction) ou à son absorption, donc sa disparition complète.
- Le quatrième terme dit d'apparition par choc traduit les neutrons qui par collision vont passer d'un état  $(r, v', \vec{\Omega}', t)$  à l'état  $(r, v, \vec{\Omega}, t)$ .
- Le dernier terme traduit les sources de neutron. Dans un réacteur, la principale source de neutron provient de la fission des actinides.

On admet que les sections efficaces macroscopiques ne dépendent pas de la direction du neutron incident et qu'elles varient très lentement avec le temps (cette variation n'est cependant pas négligeable à l'échelle de la durée d'un cycle nucléaire car les compositions des matériaux évoluent comme nous l'avons déjà dit dans le paragraphe I.1.iv). Ainsi, la section efficace macroscopique totale peut se réécrire :

$$\Sigma_t(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = \Sigma_t(\vec{r}, v)$$

La section de diffusion ne dépend que de l'angle de diffusion entre le neutron incident et le neutron diffusé. Ainsi, elle devient :

---

<sup>9</sup> Aux corrections relativistes près, la variable énergie est équivalente à la variable vitesse via la relation  $E = 1/2mv^2$

<sup>10</sup> Intégrale par rapport aux variables  $v$  et  $\Omega$  différentielle par rapport à  $r$  et  $t$



$$\Sigma_s(\vec{r}, (v', \vec{\Omega}')) \rightarrow (v, \vec{\Omega}), t) = \Sigma_s(\vec{r}, v \rightarrow v', \mu)$$

où  $\mu$  est le cosinus de l'angle de diffusion.

Pour les photons, le terme de source est différent. Il est estimé à partir des taux de réactions neutroniques. Par conséquent, l'équation du transport des photons ne peut pas être résolue sans résoudre préalablement l'équation du transport neutronique.

### I.3.ii Résolution déterministe de l'équation du transport

L'équation de Boltzmann sous sa forme générale ne possède pas de solution analytique. Pour la résoudre, Il est donc nécessaire d'appliquer des méthodes de résolutions numériques. La résolution dite déterministe impose donc une discrétisation de toutes les variables du flux:

- Discrétisation en espace
- Discrétisation en énergie
- Discrétisation en angle
- Discrétisation en temps

#### I.3.ii.a Méthodes de résolution et discrétisation des variables spatiales $r$ et $\Omega$

Il existe plusieurs méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann qui nécessitent chacune une discrétisation particulière des variables spatiales. Elles possèdent toutes leurs avantages et leurs inconvénients.

La méthode  $P_{ij}$  est l'une des plus simples à appréhender<sup>11</sup>. Elle est également celle faisant appel aux hypothèses simplificatrices les plus fortes. Elle consiste à calculer les probabilités de première collision dans un volume  $i$  d'un neutron créé dans un volume  $j$  puis d'en déduire par un calcul itératif le flux neutronique dans chaque volume élémentaire. La variable angulaire n'est en général pas traitée via cette méthode car cela peut causer en termes informatiques une surcharge de la mémoire vive nécessaire pour le calcul. Un terme de correction de transport est généralement introduit afin de prendre en compte de manière approximative les effets angulaires. La probabilité de première collision dans un volume  $j$  d'un neutron d'énergie  $E$  créé dans un volume  $i$  est déduite d'une forme intégrée en espace de l'équation de Boltzmann. Elle prend pour expression :

$$P_{ij}(E) = \frac{1}{V_j} \int_{(i)} d^3r \int_{(j)} d^3r' \frac{e^{-\tau(E)}}{4\pi R^2}$$

$$\tau(E) = \int_0^s \Sigma(\vec{r} - s'\vec{\Omega}, E) ds'$$

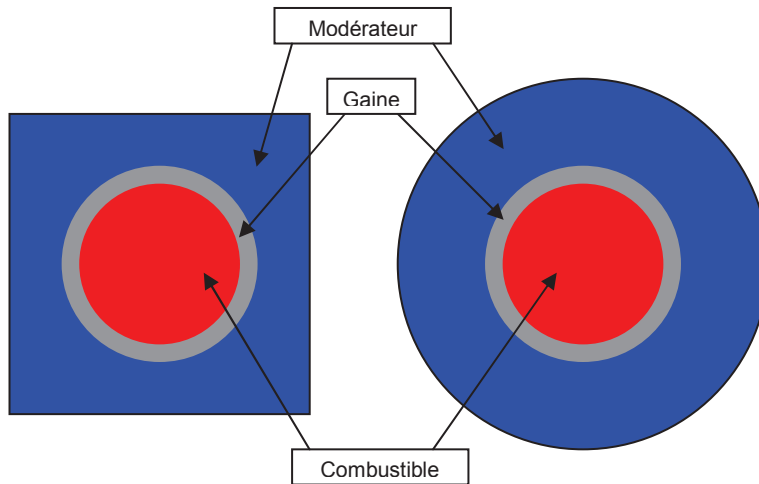
$\tau$  est la longueur optique et traduit l'atténuation du flux neutronique sur une distance  $s$ .

Souvent, afin de simplifier la résolution de l'équation de Boltzmann à l'aide de la méthode  $P_{ij}$ , la géométrie du problème est modifiée. La géométrie totale est divisée en cellules carrées qui sont elles-mêmes cylindrisées. Par exemple, dans un cœur constitué d'un réseau de crayons combustibles, chaque cellule contient un crayon et l'eau qui l'entoure. La cylindrification de cette cellule est représentée sur la Figure I-2. Nous pouvons

---

<sup>11</sup> Sa mise en application reste cependant complexe

voir que seule la partie modératrice a été modifiée. Notons qu'il existe plusieurs formalismes pour estimer le rayon externe de la cellule cylindrisée.



**Figure I-2 Cylindrisation des cellules combustibles pour le calcul  $P_{ij}$**

La méthode des ordonnées discrètes ( $S_n$ , différences finies, ...) consiste à simplifier le terme d'apparition par choc de l'équation intégrô-différentielle de Boltzmann. Pour cela, la section efficace de transfert par diffusion et le flux sont discrétisés en angle par projection sur l'espace des polynômes de Legendre dans un calcul en deux dimensions ou sur les harmoniques sphériques pour un calcul en 3 dimensions. Ainsi, en sous-entendant la variable énergie, le flux neutronique devient :

$$\phi(\vec{r}, \mu) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(\vec{r}) P_n(\mu)$$

Contrairement à la méthode  $P_{ij}$ , l'anisotropie du choc est cette fois-ci bien prise en compte. Cependant, il est indispensable d'effectuer une discrétisation de la géométrie du problème selon un découpage spatial cartésien constitué de mailles parallélépipédiques toutes identiques entre elles. Par conséquent, lorsque le calcul est effectué sur une géométrie contenant des cylindres ou toute autre surface courbe (c'est à dire toute géométrie contenant des crayons combustibles), les volumes élémentaires de calcul ne peuvent pas correspondre aux volumes réels. Par conséquent, la concentration des éléments dans chaque maille de calcul doit être homogénéisée entre tous les volumes « réels » qui la composent de sorte que la quantité de matière totale soit conservée.

La dernière méthode dite des caractéristiques consiste à calculer le flux moyen intégré sur une droite de « tracking » appelée caractéristique. Cette méthode prend en compte les effets angulaires sur le calcul du transport sans imposer un découpage spatial particulier. Aussi fin soit-il, le découpage spatial utilisé peut très bien conserver les interfaces « réelles » entre les différents matériaux du problème. Aucune homogénéisation n'est donc obligatoire contrairement à la méthode des ordonnées discrètes. Cette dernière méthode a été retenue en tant que référence par le CEA pour les calculs déterministes de réacteur nucléaire de type REP. Le découpage spatial utilisé, notamment dans la partie combustible, a été optimisé afin de réduire les biais de calcul.

Les détails des méthodes de résolution  $P_{ij}$  et  $S_n$  sont très bien décrits dans la référence [1]. Le principe de la résolution MOC est expliqué en détail dans le chapitre 2 de la thèse soutenue par Romain Le Tellier [6].

### I.3.ii.b Discrétisation en énergie : le phénomène d'autoprotection

La résolution déterministe de l'équation du transport nécessite de discrétiser la variable énergie. Le flux neutronique est donc calculé dans différents groupes d'énergie. Il est donc nécessaire d'utiliser des sections efficaces multi-groupes obtenues à partir des bibliothèques standard. Dans chaque groupe, la section efficace est moyennée en énergie.

Pour des raisons de temps de calcul, les maillages usuels utilisés ne sont pas suffisamment fins pour reproduire rigoureusement la forme de la section efficace dans le domaine énergétique des résonances. Ainsi, certains groupes d'énergie peuvent contenir une ou plusieurs résonances. La section efficace moyenne dans ces groupes est donc très élevée. Par conséquent, avec cette section moyennée, le flux neutronique calculé dans ce groupe sera très atténué et les taux de réactions calculés ne correspondront pas à la réalité physique du problème. Plus la hauteur de la résonance est élevée et plus cette dépréciation du flux sera importante, d'où le qualificatif d'autoprotection des résonances. Ce phénomène doit être pris en compte lors de la production des sections efficaces multigroupes.

Pour cela, elle est calculée en utilisant un flux de pondération :

$$\sigma_{i,j}^g(\vec{r}) = \frac{\int_g \sigma_{i,j}(E) \cdot \phi(\vec{r}, E) dE}{\int_g \phi(\vec{r}, E) dE}$$

Ce flux de pondération dépend très fortement de la géométrie du problème considéré. Il n'est donc pas possible de posséder une bibliothèque de sections efficaces multigroupes tabulées qui soit adaptée à n'importe quel problème de transport neutronique. Le traitement de l'autoprotection par les codes déterministes et notamment le calcul de ce flux de pondération est très bien expliqué dans la référence [7].

### I.3.ii.c Discrétisation de la variable temporelle : résolution de l'équation de Bateman

Dans un réacteur nucléaire, la composition des matériaux évolue avec le temps. Les réactions nucléaires et la radioactivité changent les concentrations isotopiques de chaque noyau. Par conséquent, dans l'équation de Boltzmann, sur des échelles de temps de quelques jours, il n'est plus possible de considérer que les sections efficaces sont indépendantes du temps. Le flux lui-même n'est donc pas indépendant du temps même si sa variation reste négligeable.

Ainsi, pour résoudre l'équation de Boltzmann en prenant en compte la variable temporelle, nous résolvons l'équation d'évolution aussi appelée équation de Bateman. Celle-ci dépend aussi bien des taux de réactions que des constantes de désintégration radioactives :

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = B_i + \sum_j C_{ij} N_j(t) - C_{ii} N_i(t)$$

- $B_i$  est le terme d'apparition par fission et vaut  $N_f \cdot \sigma_f \cdot \phi \cdot Y_{fi}$  où  $N_f$  est la concentration en noyau fissile,  $\sigma_f$  la section de fission,  $\phi$  est le flux neutronique et  $Y_{fi}$  le rendement indépendant de fission du noyau  $i$ .
- $C_{ij}$  est le terme d'apparition du noyau  $i$  par la désintégration radioactive ou une réaction nucléaire sur le noyau  $j$ . Ce terme vaut  $\lambda_{ij} + \sigma_{ij} \phi$ .  $\lambda_{ij}$  est la constante de désintégration radioactive du noyau  $j$  vers le noyau  $i$ .  $\sigma_{ij}$  est la section efficace de la réaction neutronique sur le noyau  $j$  qui conduira à la formation du noyau  $i$

- $C_{ii}$  est le terme de disparition du noyau  $i$  par désintégration radioactive ou par réaction nucléaire. Ce terme vaut  $\lambda_i + \sigma_i \phi$ .  $\lambda_i$  est la constante de désintégration radioactive du noyau  $i$ .  $\sigma_i$  est la section efficace d'absorption du noyau  $i$ .

On obtient donc un système d'équations interdépendantes régissant l'évolution de chaque noyau composant les matériaux. La solution de ce système est la concentration de chaque noyau en fonction du temps. Il est possible de résoudre analytiquement ce système en projetant les solutions sur une base d'exponentielle décroissante ou de le résoudre numériquement par une méthode du type Runge-Kutta.

Le problème de la résolution temporelle de l'équation de Boltzmann est donc découplé. D'un côté, les flux neutroniques sont calculés en tout point afin de définir les taux de réactions sans tenir compte de la variable temporelle. Ensuite, à partir de ces taux de réactions, l'équation de Bateman est résolue sur un certains pas de temps. Cela permet de connaître les nouvelles concentrations isotope par isotope dans les matériaux. Le processus recommence ensuite en recalculant le flux et les taux neutroniques en prenant en compte les nouvelles concentrations calculées.

La résolution de l'équation de Bateman permet de reconstruire le spectre de photon  $\gamma$  retardé émis à chaque instant par les noyaux radioactifs :

$$S_r(E_\gamma, t) = \sum_i \lambda_i N_i(t) S_i(E_\gamma)$$

$\lambda_i N_i(t)$  est l'activité de l'isotope et  $S_i(E_\gamma)$  est le spectre d'émission  $\gamma$  par désintégration radioactive du noyau  $i$ .

### I.3.iii Résolution Monte Carlo de l'équation de transport

La méthode dite Monte Carlo ne résout pas l'équation de Boltzmann à proprement parlé. Elle consiste à simuler un très grand nombre d'histoires neutroniques. Une histoire est un parcours emprunté par un neutron depuis sa création jusqu'à sa disparition. Chaque histoire neutronique est obtenue en effectuant des tirages aléatoires sur les lois de probabilités régissant les chocs (choix de l'interaction, perte d'énergie par diffusion, angle de diffusion, ...) et le transport (distance parcourue entre deux chocs) des neutrons. Les lois de probabilités sont obtenues à partir des bibliothèques ponctuelles standards. Pour une explication détaillée des caractéristiques d'un calcul Monte Carlo, le lecteur pourra faire appel à la référence [8].

On peut retenir qu'un calcul Monte Carlo estime une quantité  $u$  (en général un taux de réaction ou un  $k_{\text{eff}}$ ) en la moyennant sur toutes les histoires simulées. Nous obtenons ainsi une valeur moyenne notée  $\bar{u}$ , à laquelle nous pouvons associer un écart-type  $\sigma$ . Si une infinité d'histoires sont simulées l'écart-type tend vers 0 et  $\bar{u}$  doit tendre vers la valeur réelle de la quantité  $u$ . Dans la réalité, il n'est évidemment pas possible de simuler une infinité d'histoires. Le théorème de la limite centrale permet cependant de définir les intervalles de confiance sur la valeur moyenne calculée lorsque le nombre d'histoires est suffisamment important. Ainsi, il y a 68% de chance que  $u \in [\bar{u} - \sigma, \bar{u} + \sigma]$  et 95% de chance que  $u \in [\bar{u} - 2\sigma, \bar{u} + 2\sigma]$ .

Pour réduire la taille de l'intervalle de confiance et donc obtenir une meilleure précision sur les résultats du calcul, la première solution consiste à augmenter le nombre d'histoires simulées. L'écart-type varie proportionnellement à  $1/\sqrt{N}$  où  $N$  est le nombre d'histoires simulées. Il faut donc multiplier le nombre d'histoires par 4 (ce qui revient à multiplier le temps de calcul par 4 également) pour que l'écart-type (et la taille de l'intervalle de confiance) soit divisé par deux. Pour éviter cette augmentation en  $t^2$  du temps de calcul, il existe également des méthodes de biaisage permettant d'améliorer la convergence sans

pour autant augmenter le nombre d'histoires simulées. Ces méthodes consistent souvent à privilégier certains événements neutroniques particuliers (par exemple la diffusion d'un neutron dans une direction particulière) qui contribuent au calcul du paramètre considéré. Un poids doit être attribué aux événements biaisés afin de conserver les valeurs réelles du problème.

Contrairement aux calculs déterministes, le calcul Monte Carlo ne nécessite ni découpage spatial, ni maillage énergétique multigroupe. Le calcul Monte Carlo fait donc appel à beaucoup moins d'approximations qu'un calcul déterministe. C'est pourquoi les calculs Monte Carlo font souvent office de calcul de référence pour valider les méthodes de calcul déterministes.

Cependant, les codes Monte Carlo ont tout de même des limites. Les temps de calcul sont souvent beaucoup plus longs que les calculs déterministes. De plus, ils ne sont pas encore adaptés pour traiter la variable temporelle. En effet, il faut effectuer autant de calculs Monte Carlo que de pas de temps. La propagation des incertitudes sur les calculs du flux neutronique et des taux de réactions d'un calcul à l'autre est très complexe à mettre en place. Les calculs Monte Carlo de références sont donc des calculs de type  $t_0$  même si de grands progrès ont été effectués ces dernières années pour traiter le problème cinétique et de *burn-up*.

#### I.3.iv Codes de résolution du transport

Il existe différents codes de résolution de l'équation du transport neutronique. On peut en dresser une liste non-exhaustive :

- APOLLO2 [9][10] est un code déterministe français dont le développement est réalisé au CEA. Ce code est financé dans le cadre d'un accord tripartite entre le CEA, AREVA et EDF. Il permet de résoudre l'équation de Boltzmann pour les neutrons et les photons sur des problèmes en deux dimensions. Ce code est particulièrement optimisé pour les calculs liés au réacteur de type REL. Un schéma de calcul a été étudié afin de minimiser les biais liés aux approximations tout en conservant des temps de calcul raisonnables. Ce schéma nommé SHEMA-MOC[14] à simple ou double niveau préconise entre autres l'utilisation d'une bibliothèque multigroupe condensée sur un maillage nommé SHEMA contenant 281 groupes. Cette bibliothèque doit bien évidemment être autoprotégée. Ce maillage énergétique a été optimisé pour les calculs dans les cœurs de types REL[15]. Il traite notamment les deux premières résonances de l' $^{238}\text{U}$  de manière fine. Nous reviendrons sur le schéma de calcul SHEMA-MOC dans le chapitre 8 de ce document. APOLLO2 permet également d'effectuer des calculs d'évolutions simplifiés en ne prenant en compte qu'un nombre restreint (mais essentiel) de produits de fission.
- MCNP/MCNPX est un code Monte Carlo américain en 3 dimensions permettant de simuler le transport de particules : neutron, photon, électron et positon mais aussi les particules chargées plus lourdes. A l'heure actuelle, il est l'un des codes de référence internationale du transport de particule.
- TRIPOLI4 [11][12] est un code Monte Carlo en 3 dimensions développé au CEA dont le développement est financé comme pour APOLLO2 dans le cadre d'un accord tripartite entre le CEA, AREVA et EDF. Ce code peut simuler le transport de 4 types de particules : les neutrons, les photons, les électrons et les positons. Il tend à être de plus en plus utilisé au sein du CEA et dans un cadre industriel.
- Le formulaire DARWIN-PEPIN [13] qui est développé au CEA couple le code APOLLO2 avec le code d'évolution PEPI2 afin de résoudre l'équation de Bateman dans une géométrie particulière. Contrairement à l'utilisation du code APOLLO2 seul, ce formulaire permet de suivre l'évolution de tous les noyaux

(notamment les produits de fission) en résolvant les équations de Bateman de manière analytique ou numérique. Ce formulaire est très utilisé pour les calculs de puissance résiduelle.

- TRIPOLI4D est une version du code TRIPOLI4 permettant d'effectuer des calculs Monte Carlo en évolution. Ce code a été mis à disposition très récemment et est actuellement dans une phase de qualification dans les laboratoires du CEA.

Il existe de nombreux autres codes déterministes comme Monte Carlo permettant de simuler le transport des particules.

## **I.4 Quelques notions sur le transport des électrons**

Il peut arriver dans certains cas que le calcul de certaines quantités soit sensible au transport électronique. Dans ce cas précis, le transport des électrons doit être simulé.

L'équation du transport électronique est beaucoup plus complexe que pour les particules neutres car les électrons subissent en permanence des interactions de longues portées. Leur trajectoire n'est donc pas rectiligne entre deux chocs successifs. L'électron subit donc des interactions continues et discrètes. Le nombre de chocs subis par les électrons depuis leurs éjections de leurs cortèges électroniques jusqu'à leurs arrêts est de l'ordre de plusieurs dizaines de milliers alors que les neutrons et les photons sont stoppés au bout de seulement quelques dizaines de collisions. Par conséquent, il est impossible d'effectuer un calcul prenant en compte le transport électronique collision par collision car cela prendrait un temps beaucoup trop long.

Afin de pouvoir tout de même simuler le transport électronique sur des échelles de temps raisonnables, les codes Monte Carlo utilisent le formalisme de diffusion multiple. Celui-ci s'appuie sur la théorie des histoires condensées développées par Lewis. Elle permet de condenser un grand nombre d'événements, dont chacun a individuellement très peu d'influence sur la vie de l'électron, en un seul qui est représentatif de l'ensemble des interactions subies. Plusieurs formalismes sont possibles et sont détaillés dans la référence [15].

Malgré cette approximation, le calcul du transport des électrons reste tout de même très lourd et nécessite beaucoup plus de temps de calcul que lors du transport des neutrons et des photons. Nous en reparlerons dans le chapitre 7.





## **Chapitre II Vieillessement des matériaux spécifiques des réacteurs nucléaires**

Dans le chapitre précédent, nous avons vu qu'un réacteur nucléaire en fonctionnement génère en permanence un très grand nombre de particules dont les deux plus importantes d'un point de vue transport sont les neutrons et les photons. Les énergies transportées par celles-ci varient entre quelques meV et plus d'une dizaine de MeV. Dans un réacteur nucléaire en fonctionnement, les différents matériaux subissent donc une irradiation continue. Celle-ci peut induire une augmentation de leurs températures et modifier leurs propriétés mécaniques et physiques intrinsèques. On parle ainsi d'échauffement nucléaire et de vieillissement voir même d'endommagement des matériaux sous irradiation. La maîtrise et l'estimation de cet endommagement est un paramètre essentiel pour garantir la sûreté d'un réacteur. La cuve en acier étant un élément irremplaçable dont la bonne condition permet de garantir la durée de vie d'un réacteur nucléaire, son endommagement sous irradiation est soumis à une attention particulière.

A l'échelle microscopique, l'endommagement des matériaux est presque uniquement dû aux interactions des neutrons de hautes énergies ( $E_n > 0.5$  MeV) avec la matière. Ainsi, plus le niveau de flux neutronique rapide dans un matériau est élevé, plus les processus de vieillissement sont importants et rapides. Pour augmenter la durée de vie des réacteurs de 3<sup>ème</sup> génération, on cherche donc à diminuer la fluence de neutron rapide (le débit de neutron rapide) atteignant la cuve.

Dans ce chapitre, nous établissons une liste non exhaustive des différents effets mécaniques liés au vieillissement des matériaux en rappelant leurs origines cristallographiques. La plupart des effets décrits sont expliqués plus en détail dans la référence [16].

### **II.1 Approche microscopique du vieillissement des matériaux sous irradiation**

#### **II.1.i Rappel de cristallographie**

Les matériaux utilisés dans les réacteurs nucléaires ont une structure cristalline. Cela signifie qu'à l'échelle microscopique les atomes sont tous positionnés les uns par rapport aux autres en obéissant à une loi géométrique précise. Celle-ci dépend d'une structure élémentaire appelée maille cristalline qui est constituée de quelques atomes agencés dans l'espace de manière précise. Cette maille est reproduite le long de plusieurs directions particulières qui dépendent de sa forme. Une maille cristalline élémentaire peut très bien être constituée de plusieurs atomes différents. C'est ce que l'on observe notamment dans les alliages.

Un cristal n'est jamais parfait. Il contient des défauts. Par exemple, à l'échelle mésoscopique (la dimension exacte peut varier de plusieurs ordres de grandeurs selon les cas), des grains cristallins apparaissent. Dans chacun de ces grains, l'agencement des atomes correspond à la structure cristalline. Cependant, l'orientation des mailles cristallines est différente dans chaque grain. Les directions le long desquelles celles-ci sont reproduites ne sont pas les mêmes. La zone limite entre chaque grain est appelée joint de grain. Dans cette région, l'agencement des atomes ne suit aucune loi cristalline particulière.

On peut classer les défauts cristallins en plusieurs catégories. On en cite deux :



- Les défauts électroniques qui sont créés par l'insertion d'un élément étranger dont le nombre d'électrons de valence<sup>12</sup> est différent de celui des atomes du cristal. Ce défaut conduit à un excès d'électrons ou au contraire à la présence de trous d'électrons. Ils sont notamment observés dans les matériaux semi-conducteurs dopés.
- Les défauts atomiques qui sont une perte partielle ou totale de la périodicité de la structure cristalline. On peut distinguer les défauts ponctuels tels qu'un atome manquant (lacune) ou en trop (noyau interstitiel) dans une maille élémentaire, et les défauts plus complexes tels que les joints de grain décrits précédemment. Les défauts atomiques sont ceux jouant le plus sur les propriétés mécaniques des matériaux.

La densité et la nature des défauts atomiques ont de fortes conséquences sur les propriétés macroscopiques (module d'Young, résistance, ...) d'un matériau. Par exemple, entre deux aciers de même composition, celui dont la taille des grains sera la plus élevée possédera la limite d'élasticité la plus faible. Lorsque la densité de défauts ponctuels devient trop importante, ceux-ci ont tendance à se regrouper sur les défauts complexes déjà existants, voir même à en former de nouveaux.

## II.1.ii Création de défauts ponctuels par irradiation

L'irradiation d'un matériau a tendance à créer des défauts ponctuels. C'est pourquoi nous nous y intéressons particulièrement.

### II.1.ii.a Notion de paire de Frenkel

Les paires de Frenkel sont caractéristiques des défauts ponctuels. Elles sont créées lorsqu'un atome est déplacé hors de sa position dans une structure cristalline. Ces paires sont donc constituées de la combinaison de la lacune créée et du noyau interstitiel résultant. L'énergie seuil de déplacement notée  $E_d$  qui est donc l'énergie nécessaire à la création d'une paire de Frenkel est de l'ordre de quelques dizaines d'eV<sup>13</sup>, soit une énergie très inférieure à l'énergie cinétique des neutrons et des autres particules en mouvement dans un réacteur nucléaire. La densité de paire de Frenkel dans un matériau (que l'on associe souvent à une densité de lacunes) est un paramètre très important pouvant fortement impacter les propriétés physiques et mécaniques d'un matériau.

### II.1.ii.b Production de défauts ponctuels sous irradiation

Dans un réacteur nucléaire en fonctionnement, les matériaux sont soumis à un flux constant de neutrons dont les énergies cinétiques peuvent être supérieures de plus de 6 ordres de grandeurs (jusqu'à plus de 10 MeV) à l'énergie de création d'une paire de Frenkel. Lorsqu'un neutron entre en collision avec un atome, l'énergie transférée à celui-ci est largement suffisante pour qu'il soit alors éjecté de son site dans la maille cristalline. Une paire de Frenkel est ainsi créée. Le défaut résultant est dit primaire et l'atome éjecté est le pka (*primary knocked-out atom*).

Dans un premier temps, afin de simplifier la phénoménologie de la création de défauts ponctuels sous irradiation, nous considérons que seule la diffusion élastique est susceptible de créer des pka<sup>14</sup>. Le nombre de pka créés par unité de volume par un flux monoénergétique peut alors s'estimer ainsi :

---

<sup>12</sup> Les électrons les moins liés du cortège électronique

<sup>13</sup> On retient en général la valeur moyenne de 25 eV

<sup>14</sup> Cette hypothèse n'est pas si éloignée de la réalité

$$G_p = N\sigma_{dif}\phi$$

Avec :

- $G_p$  le nombre de pka créés ( $\text{cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$ )
- $N$  la densité atomique ( $\text{cm}^{-3}$ )
- $\sigma_{dif}$  la section de diffusion neutronique élastique ( $\text{cm}^{-2}$ )
- $\phi$  le flux neutronique ( $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )

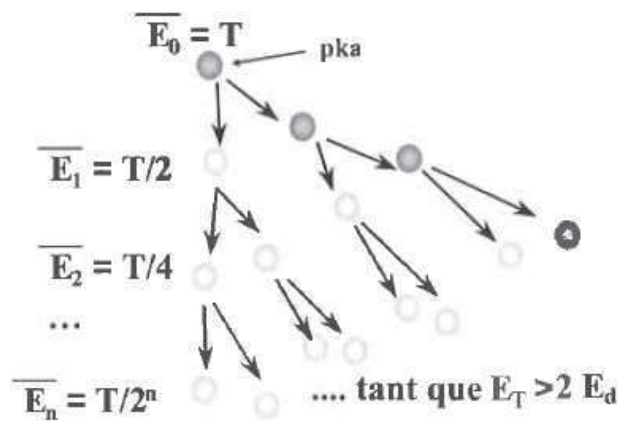
L'énergie cinétique moyenne du pka juste après la collision s'écrira :

$$\bar{T} = E_n \frac{2m_c m_n}{(m_c + m_n)^2}$$

Avec :

- $E_n$  l'énergie du neutron incident
- $m_c$  et  $m_n$  les masses du noyau et du neutron

L'énergie cinétique du pka est la plupart du temps très supérieure à l'énergie seuil de déplacement  $E_d$ . Par exemple, pour un neutron de 1 MeV interagissant avec du fer, l'énergie cinétique du pka sera d'environ 34 keV, soit de l'ordre de  $1000E_d$ . Après son éjection, le pka entre en collision avec un nouvel atome du réseau cristallin et lui cède la moitié de son énergie cinétique. Celui-ci sera donc lui-même éjecté de son site cristallin. Le pka et le nouvel atome éjecté vont de nouveau interagir et éjecter deux nouveaux atomes auxquels ils cèdent la moitié de leurs énergies cinétiques. Ce phénomène se reproduit ainsi de suite multipliant le nombre d'atomes éjectés par 2 de génération en génération jusqu'à ce que l'énergie cinétique de tous les atomes déplacés devienne inférieure à  $E_d$ . On assiste ainsi à une cascade de déplacement. Celle-ci est représentée sur la Figure II-1.



**Figure II-1 Formation d'une cascade de déplacement à partir d'un pka d'énergie cinétique  $T$**

Le nombre d'atomes secondaires déplacés durant toute la cascade à partir d'un pka d'énergie cinétique initiale  $T$  peut s'estimer ainsi :

$$N_d = \varepsilon \frac{T}{2E_d}$$

L'efficacité  $\varepsilon$  permet de prendre en compte le fait qu'une partie de l'énergie transférée est de nature non cinétique (excitation du cortège électronique, ionisation, ...) ainsi que les phénomènes liés à la fin de la cascade de déplacement lorsque les énergies cinétiques des atomes déplacés deviennent inférieures à  $E_d$ .

Il existe plusieurs modèles permettant d'estimer l'efficacité de transfert de l'énergie cinétique. On retient le modèle de Lindhard[17] pour lequel ce facteur dépend de l'énergie cinétique, de la masse et de la charge du pka ainsi que des noyaux du réseau et le modèle simplifié NRT[18] qui recommande une valeur d'environ 0.80.

Finalement, en généralisant à toutes les interactions possibles et à un flux neutronique polycinétique, on peut estimer le nombre moyen de déplacement par atome par unité de temps ([dpa.s<sup>-1</sup>]) sur toute la cascade de déplacement :

$$DPA = \int_E \phi(E) \cdot \left( \sum_X \sigma_X(E) \int_{E_d}^{E_{\max}} P(E \rightarrow T / X) \cdot N_D(T) dT \right) dE$$

Avec :

- $\phi(E)$  le flux neutronique,
- $\sigma_X(E)$  la section efficace de la réaction X,
- $P(E \rightarrow T / X)$  la probabilité que lors de la réaction X, un neutron d'énergie E crée un pka d'énergie T,
- $N_D(T)$  le nombre de déplacement induit par un pka d'énergie T.

On peut également définir une section de dpa et un facteur de dpa[19] :

$$\sigma_{dpa} = \sum_X \sigma_X(E) \int_{E_d}^{E_{\max}} P(E \rightarrow T / X) \cdot N_D(T) dT$$

$$f_{dpa} = \frac{\sigma_{dpa}}{\sigma_{tot}}$$

Telles qu'elles sont définies, la section et le facteur dpa sont relatifs à un matériau monoatomique. Elles ne prennent en compte ni les températures d'irradiation, ni les cinétiques de recombinaisons des défauts. Sachant que la plupart des paires de Frenkel créées sont quasi-instantanément recombinaisonnées, le dpa n'est pas une quantité physique mesurable. Par conséquent, en valeur absolue, le dpa n'a pas de signification physique particulière. Cette quantité est avant tout utilisée « relativement » à un matériau. Elle permet par exemple de comparer les dommages liés à l'irradiation pour différents spectres de flux neutronique[23].

### II.1.ii.c Cinétique de recombinaison des défauts ponctuels

Les lacunes et les noyaux interstitiels diffusent dans les cristaux et ont tendance à disparaître. Il existe plusieurs processus de disparition de ces défauts :

- Le noyau interstitiel rencontre une lacune dans laquelle il se loge. C'est ce que l'on appelle la recombinaison élastique des paires de Frenkel.
- Le noyau ou la lacune sont absorbés par un puits. Ces puits sont des défauts cristallins tels que les joints de grain ou les cavités.
- Les défauts s'agrègent jusqu'à former un puits.

Les équations de cinétique associées à la concentration en lacune et en noyau interstitiel peuvent s'écrire ainsi :

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} = G + D_l \nabla^2 C_l - K_{l,i} C_i C_l - \sum_{\text{puits}} K_{l,p} C_p C_l$$

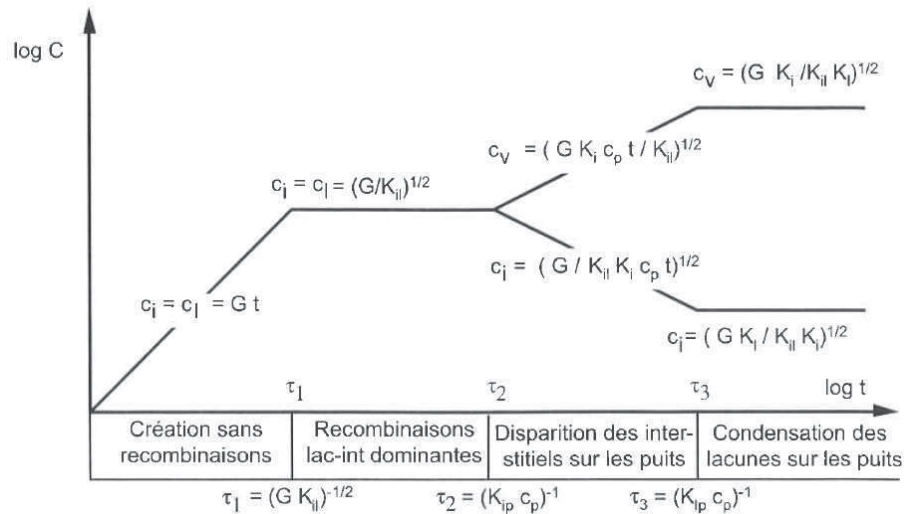
$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = G + D_i \nabla^2 C_i - K_{l,i} C_i C_l - \sum_{\text{puits}} K_{i,p} C_p C_i$$

$G$  est la vitesse de création des défauts. On peut l'associer aux dpa présentés précédemment.  $K_{l,i}$  est l'efficacité de recombinaison élastique des paires de Frenkel.  $K_{i,p}$  et  $K_{l,p}$  sont les efficacités de disparition d'un noyau interstitiel et d'une lacune dans un puits  $p$ . Ces deux dernières ne sont pas égales. En effet, les noyaux interstitiels sont beaucoup plus mobiles et disparaissent plus facilement sur les puits.

La résolution de ces deux équations couplées montre que temporellement, le processus d'évolution de la concentration peut être divisé en quatre étapes :

- Entre le début de l'irradiation et un temps  $t_1 = (K_{l,i} G)^{-1/2}$ , la concentration en lacune et en défaut croît linéairement. Les défauts ne se recombinent pas.
- Entre  $t_1$  et  $t_2 = (K_{i,p} C_p)^{-1}$ , les recombinaisons élastiques deviennent dominantes. La concentration en interstitiel et en lacune atteint un plateau
- Entre  $t_2$  et  $t_3 = (K_{l,p} C_p)^{-1}$ , la disparition des interstitiels sur les puits devient prédominante, conduisant à une augmentation de la densité de lacune et une diminution de la densité d'interstitiel
- Après  $t_3$ , la condensation des lacunes commence à devenir prédominante.

Ces quatre étapes sont représentées sur la Figure II-2.



**Figure II-2 Cinétique de recombinaison des défauts ponctuels dans un matériau cristallin**

Finalement, on peut retenir de cet aspect cinétique de la création de défaut qu'après un certain temps d'irradiation, le phénomène dominant est la recombinaison des défauts sur les puits. Par conséquent, on observe une croissance du nombre et de la taille caractéristique des défauts cristallins à l'échelle mésoscopique. On peut retenir également que la densité des défauts dans chaque étape dépend de la vitesse de création des défauts ponctuels dont les dpa sont une estimation.

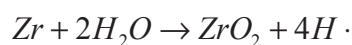
## **II.2 Effet macroscopique du vieillissement des matériaux**

L'irradiation continue des matériaux a tendance à augmenter le nombre et la taille des défauts cristallins macroscopiques. A l'échelle du réacteur, ces défauts ont une importance considérable sur les propriétés physiques et mécaniques des matériaux, notamment sur les deux premières barrières de protection que sont les gaines et la cuve.

### **II.2.i Corrosion de la gaine en zircaloy**

Dans un réacteur nucléaire, les pastilles de combustibles sont confinées par des gaines en zircaloy qui elles-mêmes baignent dans l'eau du circuit de refroidissement primaire. Celles-ci constituent la première barrière de protection car leur rôle est d'empêcher les produits de fission de pénétrer dans le circuit d'eau primaire.

L'irradiation continue de ces gaines semble favoriser la corrosion due à l'eau. Une couche d'oxyde se forme autour des gaines à travers la réaction chimique :



L'épaisseur de la couche d'oxyde varie très fortement en fonction de la température. Ainsi, dans la partie basse de la gaine, où la température est d'environ 290°C, cette épaisseur n'atteint que quelques microns tandis que dans la partie haute, à une température d'environ 325°C, elle est de près de 80 microns[16].

Une partie de l'hydrogène créé lors de cette réaction (de l'ordre de 10 à 20%) est absorbée par la gaine. A 300°C, la solubilité de l'hydrogène dans le zircaloy est de 100 ppm tandis qu'à température ambiante, elle n'est que de 1 ppm. Par conséquent, de l'hydru de zirconium précipite à froid dans le gainage de zirconium conduisant à sa fragilisation. C'est-à-dire un abaissement de la contrainte maximale avant la rupture de la gaine. Cette forme d'endommagement est l'un des éléments limitant la durée de vie des assemblages combustibles dans un réacteur.

### **II.2.ii Fragilisation sous irradiation de la cuve en acier**

La cuve constitue la seconde barrière de protection d'un réacteur nucléaire en confinant le circuit d'eau primaire. Elle est dimensionnée pour subir une pression interne de plus de 155 bars à une température supérieure à 300°C tout en subissant de nombreuses contraintes mécaniques liées aux mouvements très rapides de l'eau primaire. Par conséquent, les propriétés physiques et mécaniques de l'acier de cuve doivent être suivies en permanence pour pouvoir garantir la sûreté d'un réacteur nucléaire.

Dans les domaines de températures propres aux réacteurs nucléaires, les propriétés mécaniques de l'acier de cuve présentent deux phases distinctes :

- A basse température, l'acier a un comportement fragile. Lorsque l'on applique une contrainte croissante, on observe une rupture brutale en arrivant aux limites de l'élasticité. C'est ce que l'on appelle le clivage.
- A haute température, l'acier a un comportement ductile. En appliquant une contrainte croissante, il subit d'abord une forte déformation plastique avant de rompre. La contrainte nécessaire à la rupture est donc beaucoup plus élevée.

Quand le réacteur nucléaire est en fonctionnement, la cuve subit en permanence de nombreuses contraintes mécaniques. Par conséquent, il est indispensable qu'elle ait un comportement ductile. La température « naturelle » de transition de phase de l'acier de cuve est de -25°C, bien en-dessous de la température de fonctionnement d'un réacteur nucléaire. Cependant, il apparaît qu'une irradiation prolongée décale cette température de transition vers le haut faisant peser le risque d'un comportement fragile de la cuve lorsque le réacteur

est en fonctionnement. Pour la sûreté des réacteurs nucléaires, il est indispensable d'estimer ce décalage de température.

A travers l'accord tripartite entre EDF, FRAMATOME (AREVA/NP) et le CEA, les nombreuses observations provenant des essais Charpy[21] effectués à différentes températures sur l'acier des cuves ont été mises en commun. Cela a permis d'exprimer ce décalage en température en fonction des paramètres d'irradiation et de la composition de l'acier :

$$FIS : \Delta T = 8 + [24 + 1537 \times (\%P - 0.008) + 238 \times (\%Cu - 0.08) + 192 \times (\%Ni^2 \%Cu)] \times (F / 10^{19}) H^{0.35}$$

$$FIM : \Delta T = [17.3 + 1537 \times (\%P - 0.008) + 238 \times (\%Cu - 0.08) + 192 \times (\%Ni^2 \%Cu)] \times (F / 10^{19}) H^{0.35}$$

Avec :

- FIS est la valeur maximale du décalage de la température de transition ductile-fragile
- FIM est la valeur moyenne du décalage de la température de transition ductile-fragile
- F est la fluence de neutron d'énergie supérieure à 1 MeV exprimée en  $\text{cm}^{-2}$
- %X est la fraction massique en élément X

On constate évidemment que ces deux expressions sont empiriques et qu'elles ne peuvent être appliquées que dans un domaine d'applicabilité restreint.

## **II.3 Conclusion**

Il apparaît finalement à travers ce chapitre qu'il est très complexe de proposer des outils performants permettant de prévoir et de quantifier sur le long terme les effets de l'irradiation prolongée des matériaux typiques d'une centrale nucléaire.

D'un point de vue cristallographique, le dpa est une quantité non mesurable. Bien que sa définition soit rigoureuse, son calcul nécessite de si nombreuses approximations, que les résultats ne sont interprétés que relativement à d'autres.

Les formules empiriques d'évolution des paramètres physiques et mécaniques des matériaux telles que le FIM et le FIS, qui font appel à la valeur de la fluence des neutrons d'énergie supérieure à 1 MeV, ont des domaines d'application restreints.



## Chapitre III Echauffement local dans les matériaux spécifiques des réacteurs nucléaires

Dans le chapitre précédent, nous avons montré que sur le long terme, l'irradiation prolongée des matériaux spécifiques des centrales nucléaires conduisait à leurs endommagements. Leurs propriétés physiques et mécaniques sont altérées, les rendant notamment plus fragiles. Le second effet de l'irradiation des matériaux, qui est finalement au cœur du fonctionnement des centrales nucléaires est l'échauffement local dû aux réactions nucléaires. Celui-ci se traduit par une augmentation de la température. Contrairement au vieillissement des matériaux des réacteurs, cet effet est instantané. Par conséquent, l'estimation de cet échauffement doit être la plus précise possible afin de définir le domaine de fonctionnement d'un réacteur nucléaire.

Dans ce chapitre, nous rappellerons brièvement le principe d'une réaction nucléaire en insistant sur le bilan énergétique. Nous introduirons ensuite la notion de KERMA en détaillant ses diverses expressions pour les réactions neutroniques et photoniques. Enfin, par des exemples simples, nous montrerons l'importance de ces deux particules dans l'échauffement nucléaire des divers matériaux spécifiques des réacteurs.

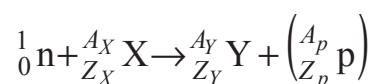
### III.1 Rappel sur les réactions nucléaires

Une particule en mouvement (photon, neutron, proton, ion lourd) perd (ou gagne) de l'énergie cinétique en interagissant avec les milieux<sup>15</sup> qu'elle traverse. Plusieurs types d'interactions avec la matière sont possibles en fonction de la nature et de la vitesse de la particule en question:

- Interaction avec le champ électromagnétique d'un atome (ion, électron, positon),
- Interaction avec le cortège électronique d'un atome (photon, électron, proton, ion lourd de haute énergie),
- Interaction avec un noyau atomique (neutron, proton et ion lourd, photon de haute énergie).

Les réactions nucléaires sont les interactions avec le noyau atomique conduisant au changement d'état (niveau d'excitation) ou de nature de celui-ci. Nous traiterons ici uniquement les réactions nucléaires neutroniques. Les autres interactions neutrons-noyaux sans changement de nature sont les diffusions élastiques<sup>16</sup>. Dans le reste de ce chapitre, par abus de langage, nous utiliserons le terme de réaction nucléaire pour désigner également les diffusions.

Le principe général d'une réaction nucléaire neutronique peut-être résumé à travers cette équation bilan :



Un neutron entre en collision avec un noyau cible X. Un noyau Y accompagné d'une ou plusieurs nouvelles particules p sont créés. Dans les réacteurs nucléaires, la plupart des noyaux cibles sont immobiles et les neutrons ont une énergie cinétique non nulle. Cette approximation n'est plus valable dans le domaine des résonances où l'effet Doppler doit être

---

<sup>15</sup> Si le milieu n'est pas vide

<sup>16</sup> Il existe cependant des cas où lors de la diffusion élastique, le neutron pénètre dans le noyau et change son moment orbital. Cette diffusion élastique dite résonante est une réaction nucléaire.



pris en compte ou lorsque le neutron atteint une énergie cinétique très faible ( $\sim < 1$  eV). C'est-à-dire aux énergies à partir desquelles l'agitation thermique n'est plus négligeable.

Les réactions nucléaires peuvent consommer ou fournir de l'énergie. Cette perte ou ce gain d'énergie est la conséquence directe de la variation du bilan de masse induite par les réactions nucléaires. En effet, la somme des masses au repos des particules du système initial est différente de celle des particules du système final. De la matière a été convertie en énergie ou vice-versa d'après la célèbre formule d'Einstein :

$$E = mc^2$$

Ainsi, on définit la chaleur de réaction notée  $Q$ , qui exprime le bilan énergétique d'une réaction nucléaire:

$$Q = (M_i - M_f)c^2$$

$Q$  est exprimée en unité d'énergie.  $M_f$  et  $M_i$  sont respectivement les masses totales des systèmes final et initial.

On distingue ainsi 3 types de réaction nucléaire en fonction du signe de  $Q$  :

- si  $Q > 0$ , la réaction est exo-énergétique. Elle produit de l'énergie. La valeur  $Q$  correspond à l'énergie dégagée par la réaction. Les réactions telles que la capture radiative ou la fission sont exo-énergétiques.
- si  $Q < 0$ , la réaction est endo-énergétique. Elle consomme de l'énergie. La valeur  $-Q$  correspond au seuil de la réaction. L'énergie du système initial doit être au moins supérieure à  $-Q$  pour que la réaction puisse avoir lieu.
- si  $Q = 0$ , la réaction est une diffusion. Le bilan énergétique total est nul.

En général, l'énergie nécessaire pour que les réactions endo-énergétiques puissent avoir lieu est fournie par l'énergie cinétique du neutron incident. Les diffusions inélastiques sont des réactions nucléaires à seuil. Cependant, contrairement aux réactions endo-énergétiques, l'énergie fournie au système initial est restaurée par le système final, d'où un bilan énergétique total nul. De même, des réactions exo-énergétiques peuvent être à seuil. C'est notamment le cas de la fission de l' $^{238}\text{U}$  pour laquelle l'énergie à fournir doit être supérieure à ce que l'on nomme la barrière de fission<sup>17</sup>. L'énergie qui est ensuite dégagée est cependant très supérieure à celle de cette barrière de fission.

## III.2 Notion de KERMA

Le KERMA est l'énergie transmise par unité de masse sous forme d'énergie cinétique aux particules chargées lors des interactions particule neutre-matière. Cette quantité permet d'**estimer** l'échauffement local dans les matériaux des réacteurs nucléaires. On traitera des limites de cette approximation ultérieurement dans ce chapitre.

Les particules chargées sont :

- Les électrons et les positons dans le cas des interactions photoniques,
- Les noyaux de recul, les ions légers (protons, particules  $\alpha$ , ...) et les ions lourds dans le cas des interactions neutroniques.

Les particules neutres sont les neutrons et les photons (et les neutrinos).

En supposant un matériau monoatomique de masse  $m$  soumis à un flux continu de neutrons monocinétiques subissant chaque seconde  $x$  interactions émettrices d'un proton

---

<sup>17</sup> En réalité, cette condition n'est pas indispensable car la barrière de fission peut être « traversée » par effet tunnel.

d'énergie  $E_p$  avec un noyau de recul d'énergie  $E_{pr}$  et  $y$  interactions émettrices d'un neutron d'énergie  $E_n$  avec un noyau de recul d'énergie  $E_{nr}$ . La valeur du KERMA dans ce matériau en unité d'énergie par seconde sera :

$$K = \frac{x \cdot (E_p + E_{pr}) + y \cdot E_{nr}}{m}$$

D'une manière plus générale, le KERMA déposé dans un matériau quelconque soumis à un flux quelconque peut s'écrire :

$$K = \frac{1}{m} \int_0^{E_{\max}} \sum_i \sum_j \tau_{i,j}(E) E_{i,j}(E)$$

$$K = \int_0^{E_{\max}} \sum_i \rho_i \sum_j \sigma_{i,j}(E) \phi(E) E_{i,j}(E) dE$$

$$K = \int_0^{E_{\max}} \sum_i \rho_i \sum_j k_{ij}(E) \phi(E) dE$$

Avec :

- $i$  et  $j$  relatifs au noyau et à la réaction
- $E_{\max}$  l'énergie maximale du spectre de flux de la particule incidente
- $E_{i,j}$  l'énergie cinétique emportée par les particules chargées créées
- $\tau_{i,j}$  le taux de réaction  $j$  sur le noyau  $i$
- $\rho_i$  la densité du noyau  $i$  dans le matériau
- $k_{ij}$  est le facteur de KERMA

La principale difficulté pour calculer le KERMA consiste à estimer l'énergie emportée par les particules chargées.

### III.3 Les échauffements neutroniques

#### III.3.i Différentes expressions du KERMA neutron

Il est possible d'estimer le facteur de KERMA neutron de deux manières différentes : la méthode directe et la méthode du bilan énergétique (*Energy balance*).

La méthode directe consiste à calculer l'énergie cinétique de toutes les particules chargées émises lors d'une réaction nucléaire en incluant le noyau de recul. Ainsi, l'expression du facteur de KERMA est :

$$k_{i,j}(E) = \sum_l \bar{E}_{i,j,l}(E) \sigma_{i,j}(E)$$

Avec  $\bar{E}_{i,j,l}(E)$  l'énergie cinétique moyenne emportée par la  $l^{\text{ème}}$  particule chargée émise lors de la réaction  $j$ . Cette méthode est limitée par la qualité des bibliothèques de données nucléaires. En effet, les évaluations contenues dans les bibliothèques ne contiennent pas toujours les spectres de production des particules chargées. Dans ce cas, le facteur de KERMA sera trop faible car une partie de l'énergie dégagée par les réactions nucléaires n'aura pas été exprimée.

La méthode du bilan énergétique permet de s'affranchir des lacunes des bibliothèques de données nucléaires et de toujours rester cohérent vis-à-vis de l'énergie totale dégagée lors des réactions (c'est-à-dire cohérent vis-à-vis de la chaleur de réaction

Q). Le facteur de KERMA est estimé en retranchant à cette énergie disponible celle qui est emportée par les neutrons et les photons émis. L'expression du facteur de KERMA devient alors :

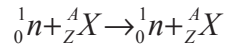
$$k_{i,j}(E) = (E + Q_{i,j} - \bar{E}_{i,j,n}(E) - \bar{E}_{i,j,\gamma}(E))\sigma_{i,j}(E)$$

Avec  $E$ , l'énergie du neutron incident,  $Q_{i,j}$  la chaleur de réaction associée à l'interaction  $j$  sur le noyau  $i$ ,  $\bar{E}_{i,j,n}$  et  $\bar{E}_{i,j,\gamma}$  les énergies moyennes emportées par les neutrons et les photons secondaires. Nous pouvons remarquer que cette expression fait apparaître une différence entre deux termes : un terme d'énergie disponible et un terme d'énergie dissipée par les neutrons et les photons. Dans les bibliothèques de données nucléaires, il arrive que ces deux termes n'aient pas été harmonisés de sorte d'être cohérents énergétiquement. Dans ce cas, il peut arriver que la différence soit négative. Ainsi, le facteur de KERMA est lui-même négatif. D'un point de vue échauffement, cela signifie que les neutrons déposent une énergie négative dans la matière. Cela n'a physiquement aucun sens. D'un point de vue échauffement global, l'énergie négative déposée par les neutrons est compensée par une surestimation de l'énergie déposée par les photons. D'un point de vue local, si le facteur de KERMA neutronique est trop faible (voire négatif), alors l'échauffement local risque d'être sous-estimé par cette méthode.

NJOY[22] est un code qui permet entre autres de traduire les informations contenues dans les bibliothèques de données nucléaires dans des formats particuliers qui sont ensuite lisibles par les codes de calcul. Il peut ainsi estimer les valeurs des facteurs de KERMA selon les deux méthodes citées.

### III.3.ii La diffusion élastique

La diffusion élastique du neutron peut être résumée par l'équation suivante :



Un neutron entre en collision avec un noyau et est diffusé sans changer la nature de celui-ci. Pour cette interaction particulière, les lois de la cinématique indiquent que l'énergie du neutron diffusé est fonction du cosinus de l'angle de diffusion. C'est pourquoi, dans les bibliothèques de données nucléaires contiennent, en plus de la section efficace, le spectre en angle du neutron diffusé. Ce spectre est représenté en fonction de  $\mu$  qui est le cosinus de l'angle de diffusion dans le référentiel du centre de masse pour différentes énergies de neutron incident. Un calcul cinématique permet de trouver l'expression de l'énergie moyenne du neutron diffusé à partir du cosinus moyen de l'angle de diffusion :

$$\bar{E}_n = \frac{E}{(A+1)^2} (1 + 2A\bar{\mu} + A^2)$$

Avec  $A$  la masse du noyau et  $\bar{\mu}$  le cosinus moyen de l'angle de diffusion défini ainsi :

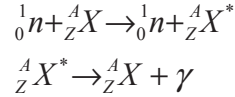
$$\bar{\mu} = \frac{\int_{-1}^1 \mu \sigma(E, \mu) d\mu}{\int_{-1}^1 \sigma(E, \mu) d\mu}$$

La seule particule chargée « émise » lors de cette réaction est le noyau de recul. D'après la méthode du bilan énergétique, son énergie cinétique est :

$$\bar{E}_r = E - \bar{E}_n = \frac{2AE}{(A+1)^2} (1 - \bar{\mu})$$

### III.3.iii La diffusion inélastique

La diffusion inélastique diffère de la diffusion élastique en laissant le noyau dans un état excité d'énergie  $E_l$ . Ce noyau perd alors son énergie interne à travers une ou plusieurs transitions  $\gamma$  successives. Une transition  $\gamma$  correspond à la désexcitation d'un noyau à travers l'émission d'un photon  $\gamma$  ou de l'expulsion d'un électron de son cortège électronique. Cet électron est appelé électron de conversion. La réaction de diffusion inélastique peut être résumée par les équations suivantes :



Lorsque l'énergie transférée au noyau correspond à un niveau discret connu du schéma de niveau, alors l'énergie du neutron diffusé dépend du cosinus de l'angle de diffusion comme dans le cas de la diffusion élastique. L'énergie moyenne du neutron réémis prend pour expression :

$$\begin{aligned} \overline{E_n} &= \frac{E}{(A+1)^2} (1 + 2R\bar{\mu} + R^2) \\ R &= A \sqrt{1 - \frac{(A+1)E_l}{AE}} \end{aligned}$$

Si l'on néglige les électrons de conversion, l'énergie emportée par les photons  $\gamma$  est tout simplement l'énergie d'excitation du noyau avant la cascade de transition  $\gamma$ . Avec cette hypothèse, le noyau de recul est alors la seule particule chargée « émise » comme c'était le cas pour la diffusion élastique. L'expression de l'énergie du noyau de recul s'écrit donc d'après la méthode du bilan énergétique :

$$\overline{E_r} = E - \overline{E_n} - \overline{E_\gamma} = \frac{2AE}{(A+1)^2} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{A+1}{A} \frac{E_l}{E} \bar{\mu}} \right) - \frac{E_l}{A+1}$$

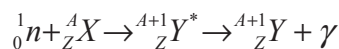
Dans le cas où l'énergie transmise ne correspond pas à un niveau discret connu du schéma de niveau, il n'est plus possible de connaître la relation entre l'angle et l'énergie du neutron émis par un calcul de cinématique. Les spectres d'émissions photoniques et neutroniques en angle et en énergie sont normalement fournis dans les évaluations. Les énergies moyennes des neutrons et des photons sont tout simplement déduites de ces spectres d'émission :

$$\overline{E_x}(E) = \int_0^{E_{\max}} E' g(E', E) dE'$$

Où  $x$  est la nature de la particule (neutron ou photon),  $g$  est le spectre d'émission (souvent issu de systématiques) de la particule tabulée dans les bibliothèques de données nucléaires.  $E_{\max}$  est l'énergie maximale de ce spectre.

### III.3.iv La capture radiative

La capture radiative est l'absorption d'un neutron par un noyau qui se désexcite ensuite par une cascade de transitions  $\gamma$ . Cette réaction peut être résumée par l'équation :



En négligeant les électrons de conversion, la seule particule chargée « émise » est le noyau de recul. Cependant, cette fois-ci, la quasi-totalité de l'énergie disponible après la réaction est transmise aux photons émis lors des transitions  $\gamma$ . L'énergie du noyau de recul

est très faible en comparaison. Par conséquent, le facteur de KERMA neutron est très petit. La capture radiative correspond au cas typique pour lequel la méthode du bilan énergétique atteint ses limites. Si le spectre de production photonique n'est pas cohérent énergétiquement dans les bibliothèques de données nucléaires alors le facteur de KERMA neutron peut devenir négatif. Par conséquent, il est plus prudent de calculer ce facteur de KERMA d'après la méthode directe. L'énergie du noyau de recul devient alors, en supposant que l'émission photonique est isotrope :

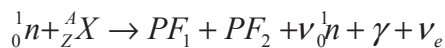
$$\overline{E_r} = \frac{E}{A+1} + Y_\gamma \frac{\overline{E_\gamma^2}}{2(A+1)m_n c^2}$$

Avec :

- $Y_\gamma$  est la multiplicité du spectre d'émission de photon  $\gamma$
- $\overline{E_\gamma^2}$  est l'énergie au carré moyenne du spectre d'émission de photon  $\gamma$
- $m_n c^2$  est l'énergie de masse du neutron au repos

### III.3.v La fission

La fission d'un noyau par capture d'un neutron peut être résumée à travers l'équation suivante :



Un neutron entre en collision avec un noyau. Celui-ci se scinde en deux noyaux plus légers appelés fragments de fission (il arrive parfois que l'on observe une fission ternaire voir quaternaire). Ces fragments de fissions vont se désexciter en émettant des neutrons et des photons. Après ces émissions, les deux noyaux résultant sont les produits de fission. Le couple de produits de fission n'est pas constant entre deux fissions. On définit ainsi les probabilités d'apparition des produits de fissions par une quantité nommée rendement de fission. Ces probabilités dépendent de l'énergie du neutron incident. Par conséquent, le bilan de masse et la chaleur de réaction dépendent également de l'énergie du neutron incident. Cependant, dans les bibliothèques de données nucléaires, celle-ci n'est donnée que sous la forme d'une somme de plusieurs termes indépendants de l'énergie du neutron incident :

- L'énergie des fragments de fission
- L'énergie des neutrons prompts et retardés
- L'énergie des  $\gamma$  prompts
- L'énergie des  $\gamma$  et des  $\beta$  retardés
- L'énergie des neutrinos

Dans l'expression du KERMA par la méthode du bilan énergétique, il est nécessaire de prendre en compte les neutrinos ainsi que la dépendance énergétique de la chaleur de réaction. Par conséquent, dans la formule du facteur de KERMA, on utilise une chaleur de réaction effective  $Q'$  dépendante de l'énergie du neutron incident. Dans le code NJOY, son l'expression en eV s'écrit :

$$Q'(E) = Q - 8.07 \cdot 10^6 (\bar{\nu}(E) - \bar{\nu}(0)) + 0.057E + 0.100E - E_{\beta D} - E_{\gamma D}$$

Le troisième terme prend en compte l'évolution de la masse des produits de fission. Le quatrième terme estime la dépendance en énergie de l'émission des neutrinos. Les deux

derniers termes sont les énergies des  $\beta$  et des  $\gamma$  retardés que l'on considère comme indépendantes de l'énergie du neutron incident.

### III.4 Les échauffements photoniques

Le KERMA photonique est calculé de manière identique au KERMA neutronique. Il est tout d'abord nécessaire de calculer le flux photonique en résolvant l'équation de Boltzmann. Ensuite, ce flux est convolué à des facteurs de KERMA pour en déduire le KERMA photonique total.

Dans cette partie, nous détaillerons les différentes interactions entre les photons et la matière en donnant l'expression des facteurs de KERMA associés. Le traitement des sources de photons dans un réacteur sera étudié en détail dans un prochain chapitre.

#### III.4.i Les interactions photon-matière

Contrairement aux neutrons, la principale interaction des photons avec la matière ne se fait pas avec les noyaux atomiques mais avec les électrons du cortège électronique. On parle ainsi d'interactions photo-atomiques. Par conséquent, la nature du noyau est inchangée et la notion de chaleur de réaction perd ici son sens<sup>18</sup>.

Les particules chargées émises suite aux interactions photo-atomiques sont les électrons et les positons. Dans les conditions de fonctionnement d'un réacteur nucléaire, l'énergie du noyau de recul est si faible en comparaison de l'énergie cinétique de ces particules qu'elle est toujours négligée. Ainsi, le facteur de KERMA photon prend pour expression via les méthodes directes et du bilan énergétique :

$$k_{ij} = \sigma_{i,j} (\overline{E_{e^-}} + \overline{E_{e^+}})$$

$$k_{ij} = \sigma_{i,j} (E_{\gamma}^{incident} - E_{\gamma}^{émis})$$

On peut distinguer au moins 4 interactions entre les photons et la matière :

- La diffusion élastique aussi appelée diffusion Rayleigh
- La diffusion inélastique aussi appelée diffusion Compton
- L'effet photoélectrique
- La création de paire

Toutes les données relatives aux interactions particules-matière sont disponibles dans la bibliothèque de données EPDL97[23][24] que nous avons évoquée dans le chapitre 1 de ce document.

##### III.4.i.a La diffusion élastique

Cette interaction correspond au changement de direction d'un photon ( $\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}' = \mu$ ) par interaction avec un électron sans perte d'énergie. La diffusion élastique sur un électron libre, que l'on nomme aussi diffusion Rayleigh, prend pour expression :

---

<sup>18</sup> A l'exception de l'effet de paire où de l'énergie est convertie en masse.

$$\frac{\partial \sigma_R}{\partial \Omega}(\mu) = \frac{r_e^2}{2} (1 + \mu^2)$$

$$r_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e c} \approx 2.82 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$$

Avec  $r_e$  le rayon électronique classique.

On remarque que dans cette formulation, la section de diffusion élastique ne dépend pas de l'énergie du photon incident. Dans le cas des électrons liés d'un atome, l'expression de la diffusion élastique doit prendre en compte la structure de celui-ci. Pour cela, un facteur de correction est introduit. L'expression de la section de diffusion élastique sur le cortège électronique d'un atome devient ainsi:

$$\sigma_{el}(E_\gamma, \mu) = f(E_\gamma, \mu) \cdot \sigma_R(\mu)$$

Le facteur de correction inclut deux termes dont les origines sont décrites dans les références [25],[26]:

- Un facteur de forme noté  $FF(E, \mu)$  prenant en compte la structure générale du cortège électronique,
- Un facteur de diffusion anormal (*Anomalous Scattering factor*) noté  $AS(E)$  permettant de minimiser la fonction de diffusion aux énergies où l'effet photoélectrique est prépondérant. Ce facteur possède une partie réelle et une partie imaginaire.

L'expression de ce facteur de correction s'exprime finalement sous la forme :

$$f(E_\gamma, \mu) = [FF(E_\gamma, \mu) + AS(E_\gamma, \mu)]^2$$

Le facteur de forme peut être ajusté selon l'expression empirique suivante :

$$FF(E_\gamma, \mu)^2 = \sum_j \frac{A_j}{[1 + B_j x]^N}$$

$$x = E_\gamma^2 (1 - \mu)$$

$$Z^2 = \sum_j A_j$$

Avec  $A_j$ ,  $B_j$  et  $N$  des facteurs d'ajustements. Ainsi, nous pouvons voir qu'il dépend uniquement de la variable  $x$  qui prend en compte le cosinus et l'énergie de la diffusion. Le nombre de termes contenus dans cette somme correspond au nombre de couches électroniques de l'atome considéré. Pour les atomes lourds, l'expérience montre qu'il n'est pas utile d'utiliser plus que 3 termes pour obtenir un très bon ajustement par rapport aux données contenues dans la bibliothèque EPDL97.

Nous avons représenté pour quatre atomes les trois termes du facteur de correction sur les Figure III-1, Figure III-2 et Figure III-3. Les valeurs sont tirées de la bibliothèque EPDL97 qui est disponible dans le format ENDL. Le facteur de forme a été représenté en fonction du paramètre  $E_\gamma \sin(\theta/2)$  qui est la racine du paramètre  $x$  de la fonction d'ajustement.



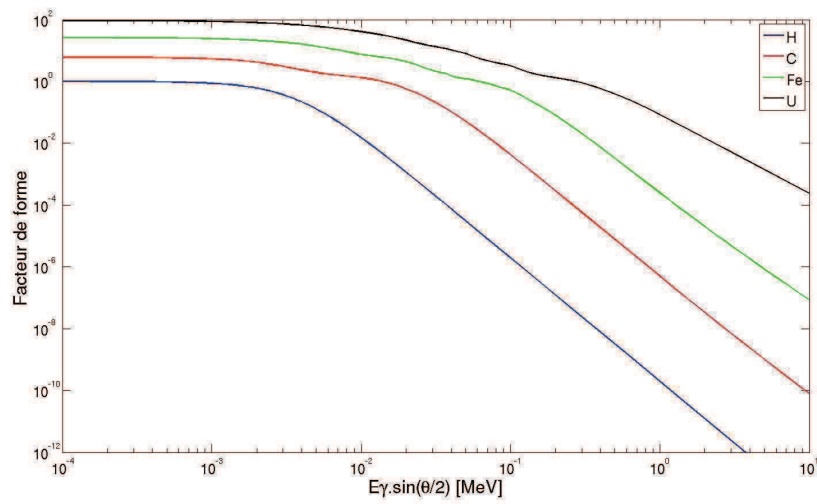


Figure III-1 Facteur de forme de la section de diffusion élastique

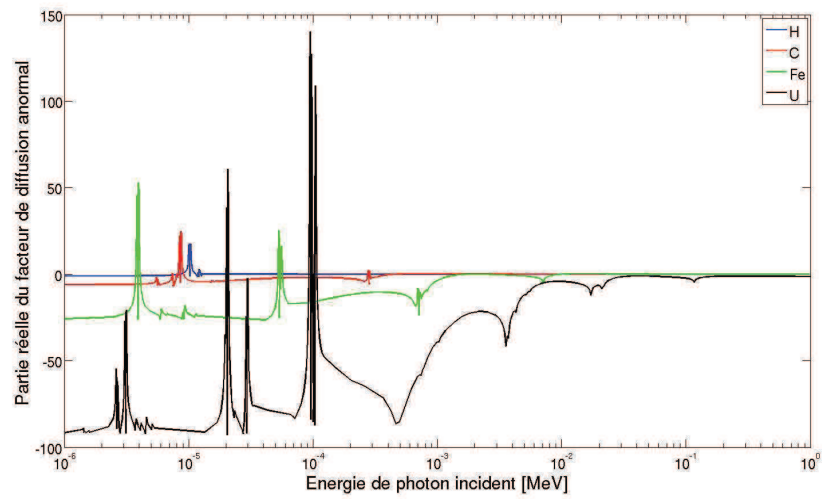


Figure III-2 Partie réelle du facteur de diffusion anormal de la section de diffusion élastique

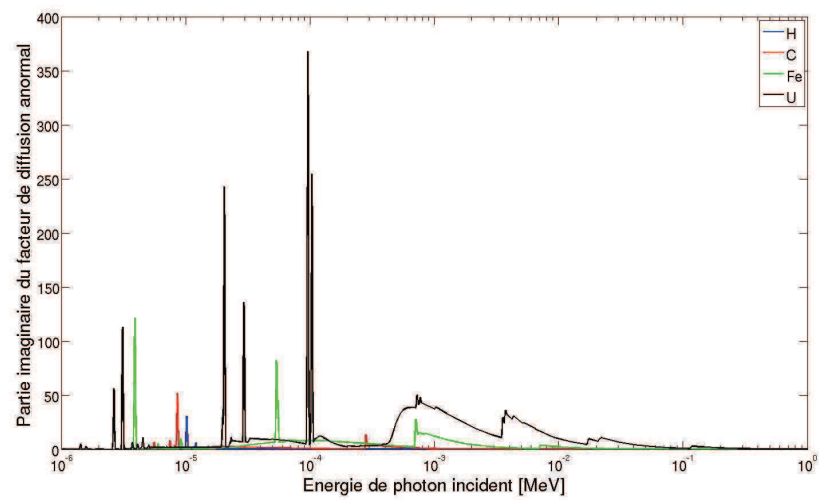


Figure III-3 Partie imaginaire du facteur de diffusion anormal de la section de diffusion élastique



Nous pouvons voir que le facteur de forme tend bien vers  $Z$  lorsque le paramètre  $E_\gamma \sin(\theta/2)$  tend vers 0 comme cela est annoncé dans sa formule empirique. La partie réelle du facteur de diffusion anormal annule le facteur de forme aux basses énergies.

D'un point de vue échauffement nucléaire, la contribution de la diffusion élastique est nulle car le photon conserve son énergie avant et après la diffusion. Aucune énergie n'est donc transférée aux électrons.

#### III.4.i.b L'effet photoélectrique

Cette interaction correspond à l'absorption d'un photon par un électron du cortège électronique. Celui-ci acquiert suffisamment d'énergie pour être éjecté du cortège électronique de l'atome auquel il appartient. L'énergie cinétique de l'électron émis est déduite de l'énergie du photon incident  $E_\gamma$  et de l'énergie de liaison de l'électron  $E_l$ :

$$E_c = E_\gamma - E_l$$

Cette réaction est à seuil puisque le photon incident doit posséder une énergie au moins supérieure à l'énergie de liaison des électrons du cortège électronique pour que celui-ci puisse être éjecté. Le remplissage du cortège électronique des atomes se fait par couche (notées K, L, M ...) dont les énergies de liaisons diffèrent les unes par rapport aux autres. La section efficace présente donc des variations en dent de scie. A chaque fois que l'énergie du photon atteint l'énergie de liaison d'une couche, une nouvelle voie partielle de l'effet photoélectrique s'ouvre et crée une augmentation brutale de la section efficace globale. La dernière dent de scie correspond à l'ouverture de l'effet photoélectrique sur la couche K qui est celle située la plus près du noyau et dont l'énergie de liaison est par conséquent la plus élevée.

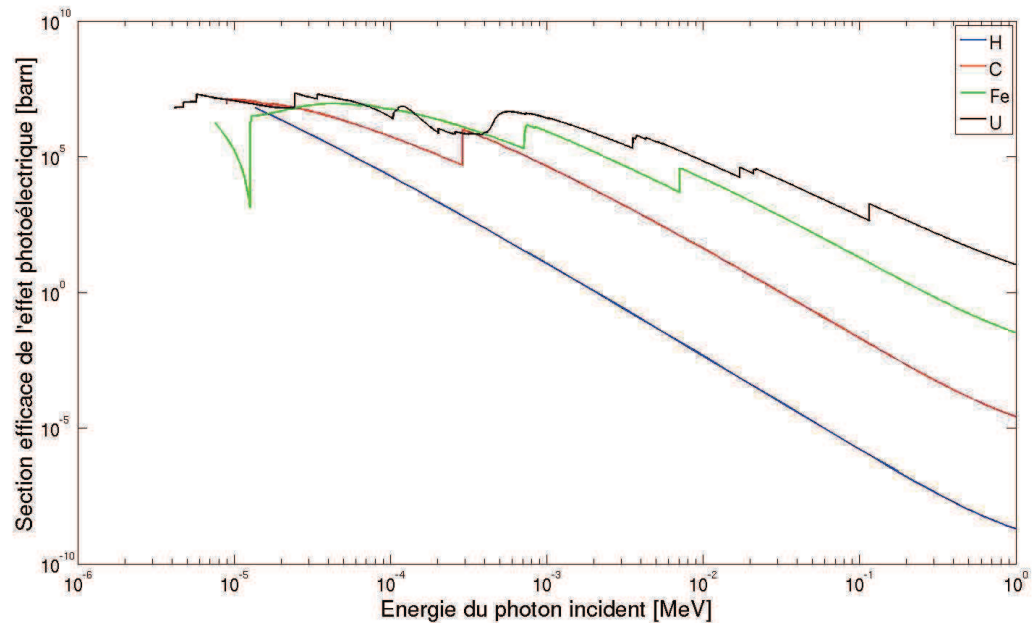
Il n'existe pas de formule générale telle que celle exprimant la diffusion Rayleigh permettant d'exprimer la section efficace de l'effet photoélectrique. Cependant, après avoir décomposé la section totale en une somme de sections partielles pour chacune des couches, il existe des modèles paramétriques comme pour le facteur de forme de la diffusion élastique :

$$\sigma_{ph} = \sum_{i=K,L,M} \sigma_{ph,i}$$

$$\sigma_{ph,i} = c_i \frac{Z^\alpha}{E_\gamma^3}$$

$c_i$  et  $\alpha$  sont les paramètres d'ajustement et  $E_\gamma$  est l'énergie du photon incident.  $\alpha$  est habituellement de l'ordre de 4 ou 5. L'expression de la section efficace partielle n'est bien évidemment valable que pour les énergies supérieures à l'énergie de liaison de la couche considérée. En dessous de cette énergie, elle s'annule.

Sur la Figure III-5, nous avons tracé la section efficace de l'effet photoélectrique pour différents atomes. Toutes les valeurs sont tirées de la bibliothèque EPDL97.



**Figure III-4 Section efficace microscopique de l'effet photoélectrique**

Nous pouvons voir qu'aux faibles énergies photoniques, il ne semble pas y avoir de loi régissant la valeur de la section efficace en fonction du nombre de charge de l'atome. A ces énergies, quel que soit l'atome considéré, seule une voie partielle de l'effet photoélectrique est ouverte, celle correspondant à la couche électronique la moins liée. Aux plus hautes énergies, à mesure que de nouvelles voies s'ouvrent, la section efficace devient d'autant plus grande que le nombre de charge atomique augmente.

Après émission du photon, le cortège électronique de l'atome n'est plus stable. Le trou laissé vacant par l'émission de l'électron va être comblé par une série de réarrangements électroniques. Les électrons des couches supérieures vont aller remplir les lacunes des couches inférieures. Ce phénomène s'accompagne de l'émission de photons de fluorescence X et d'électrons Auger.

Finalement, d'après toutes ces informations, l'expression du facteur de KERMA de l'effet photoélectrique prend pour expression :

$$k_{ph} = \sigma_{ph}(E - \overline{E_X})$$

Avec  $E$  et  $E_X$  les énergies des photons incidents et de fluorescence X. En général, on ne prend pas en compte les émissions de photons X dans le facteur de KERMA. Ces photons ont souvent une énergie si faible qu'ils se transportent sur une distance suffisamment courte pour que l'on puisse considérer qu'ils sont déposés localement à la manière des électrons.

L'effet photoélectrique est l'effet prépondérant aux énergies photoniques inférieures à quelques centaines de keV. Les bornes de ce domaine dépendent de la masse de l'atome considéré. On peut le constater dans l'expression empirique de la section efficace qui varie en  $Z^\alpha$ .

#### III.4.i.c La diffusion inélastique

Cette interaction correspond à la diffusion d'un photon sur un électron peu lié du cortège électronique. Le photon transfère une partie de son énergie à l'électron qui sera éjecté de son cortège. Cet électron est appelé électron Compton. Les équations de la

cinématique permettent de connaître l'énergie exacte du photon diffusé à partir de son angle de diffusion :

$$E_{\gamma}' = E_{\gamma} \cdot \frac{1}{1 + \frac{E_{\gamma}}{m_e c^2} (1 - \mu)}$$

Avec :

- $E$  et  $E'$  les énergies des photons incident et diffusé,
- $\mu$  le cosinus de l'angle de diffusion,
- $m_e c^2$  l'énergie de masse au repos de l'électron.

L'énergie de l'électron Compton se déduit simplement de la différence d'énergie entre le photon incident et diffusé (en négligeant l'énergie de liaison de l'électron).

La formule de Klein-Nishina permet de définir la section différentielle de la diffusion inélastique sur un électron libre :

$$\frac{\partial \sigma_{KN}}{\partial \Omega}(E_{\gamma}, \mu) = \frac{r_e^2}{2} \left( \frac{E_{\gamma}'}{E_{\gamma}} \right)^2 \left( \frac{E_{\gamma}'}{E_{\gamma}} + \frac{E_{\gamma}}{E_{\gamma}'} - 1 + \mu^2 \right)$$

On peut noter que cette section tend vers 0 lorsque l'énergie du photon incident tend vers l'infini. A l'inverse, lorsque l'énergie du photon incident tend vers de faibles valeurs, cette fonction tend vers la section de diffusion de Rayleigh définie précédemment. En général, dans cette formulation, les énergies photoniques considérées sont données en unité de masse de l'électron au repos. Elles sont notées :

$$\varepsilon = \frac{E_{\gamma}}{m_e c^2}$$

Autour d'un atome, le nombre d'électrons correspond à son nombre de charge  $Z$ . Lorsque l'énergie du photon incident est très élevée par rapport aux énergies de liaison de ces électrons, ceux-ci peuvent être considérés comme « quasi » libres du point de vue du photon. Par conséquent, aux hautes énergies, la section efficace de diffusion Compton sur un atome est le produit de la section de Klein-Nishina par son nombre de charge. La probabilité d'interagir avec cet atome équivaut à la probabilité d'interagir avec  $Z$  électrons libres. Lorsque les énergies des photons incidents sont du même ordre de grandeur que l'énergie de liaison des électrons (typiquement de l'ordre de 100 keV et moins), alors il est nécessaire d'introduire un facteur correctif. Ce facteur est la fonction de diffusion incohérente (*Scattering Function*) et est noté  $SF(E, \mu)$ . L'expression de la section différentielle de diffusion Compton d'un noyau s'écrit donc :

$$\sigma_{Comp}(E_{\gamma}, \mu) = SF(E_{\gamma}, \mu) \cdot \sigma_{KN}(E_{\gamma}, \mu)$$

Une formule paramétrique de ce facteur de forme a été proposée [26],[27],[28]:

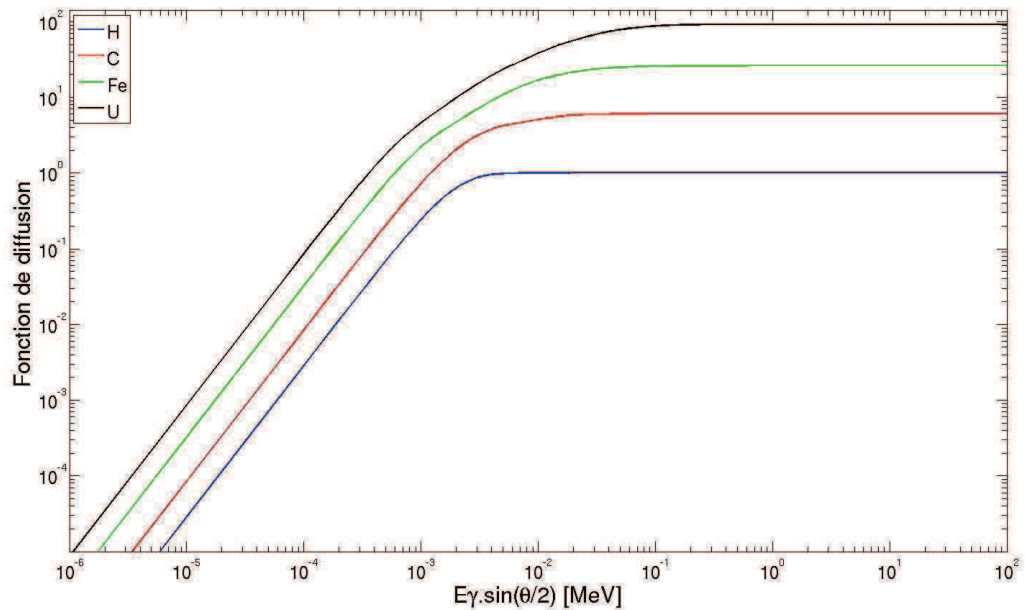
$$SF(E_\gamma, \mu) = \sum_j A_j \left( 1 - \frac{1}{(1 + B_j x)^N} \right)$$

$$\sum_j A_j = Z$$

$$x = E_\gamma^2 (1 - \mu)$$

$A_j$ ,  $B_j$  et  $N$  sont des paramètres d'ajustement. On constate que ce facteur tend bien vers  $Z$  lorsque l'énergie du photon incident tend vers l'infini. De plus, on observe l'apparition de la même variable  $x$  qui était utilisée dans le facteur de forme de la section de diffusion élastique. Le nombre de terme de cette somme dépend de la charge de l'atome considéré. Pour les noyaux de numéro atomique 1 et 2, seule la couche K est remplie et par conséquent, un seul terme est nécessaire. Entre 3 et 10, la couche L se remplit également, nécessitant un second terme. Pour les numéros atomiques supérieurs, un troisième terme est nécessaire. Comme il apparaît que la diffusion Compton s'effectue presque uniquement sur les électrons les moins liés, il n'est jamais nécessaire d'aller au-delà de 3 termes pour obtenir un bon ajustement de la fonction de diffusion incohérente avec son estimation empirique.

Nous avons représenté sur la Figure III-5 cette fonction de diffusion. Les valeurs sont tirées de la bibliothèque EPDL97. Le paramètre en abscisse est  $E_\gamma \sin(\theta/2)$ , ce qui correspond à la racine du paramètre  $x$  défini dans la fonction d'ajustement.



**Figure III-5 Fonction de diffusion de la section de diffusion inélastique**

Nous pouvons voir qu'au-delà d'une centaine de keV, la fonction de diffusion tend vers le nombre de charge de l'atome.

L'expression du facteur de KERMA de la diffusion Compton peut s'écrire (en négligeant les rayonnements X) :

$$k_{diff\ inél} = \sigma_{diff\ inél} (E - \overline{E'})$$

La diffusion Compton est prédominante là où l'effet photoélectrique et la création de paire ne le sont pas, c'est-à-dire de quelques centaines de keV à quelques MeV. Cet intervalle est réduit à mesure que la charge de l'atome considéré augmente.

#### III.4.i.d L'effet de création de paire

La création de paire est un effet se produisant uniquement avec des photons dont l'énergie est supérieure à 1.022 MeV, soit deux fois l'énergie de masse d'un électron au repos. En pénétrant dans le champ électromagnétique du noyau, le photon incident disparaît et une paire électron-positon se matérialise. Une partie de l'énergie du photon incident a ainsi été convertie en énergie de masse tandis que le reste a été uniformément partagé entre l'électron et le positon sous forme d'énergie cinétique. Cette réaction à seuil ne devient prédominante que pour de hautes énergies de l'ordre de quelques MeV.

Le positon créé perd son énergie cinétique par rayonnement de freinage et en ionisant les atomes environnants. Une fois au quasi-repos, le positon va s'annihiler avec un électron lié en créant deux photons d'énergies 511 keV qui sont émis en formant un angle de 180°.

Il existe une expression de la section efficace de l'effet de création de paire prenant en compte la charge de l'atome :

$$\sigma_{pp} = kZ^2 \ln(E_\gamma)$$

On remarque ainsi que cet effet varie avec le nombre de charge de l'atome au carré. Son domaine de prépondérance est donc beaucoup plus grand pour les noyaux lourds que pour les noyaux légers.

L'expression du facteur de KERMA s'écrit ainsi en prenant en compte les deux photons réémis lors de l'annihilation du positon:

$$k_{pp} = \sigma_{pp}(E_\gamma - 1.022)$$

#### III.4.i.e Quelques autres interactions

Parmi les interactions photo-atomiques, l'effet Raman[29] n'est pas pris en compte. Cependant, il n'agit que sur les photons de très faibles énergies et n'intervient donc presque pas dans la physique des réacteurs.

Les photons n'interagissent pas qu'avec le cortège électronique des atomes. Ils peuvent également interagir avec le noyau des atomes. On appelle ce type de réaction les interactions photo-nucléaires.

La réaction ( $\gamma, n$ ) survient dans les réacteurs nucléaires lorsque l'énergie du photon est supérieure à l'énergie de liaison du dernier neutron des atomes. Cette réaction intervient notamment sur les noyaux de deutérium ( $S_n=2.33$  MeV) et de  $^9\text{Be}$  ( $S_n=1.67$  MeV). Ainsi dans les réacteurs modérés à l'eau lourde, la production de photo-neutron doit être prise en compte lors de la résolution de l'équation de Boltzmann pour l'estimation du  $k_{eff}$  et du  $\beta_{eff}$ . Il est prévu d'effectuer le même calcul pour le nouveau réacteur d'irradiation RJH qui contiendra un réflecteur de neutrons en béryllium.

La photo-fission, notée ( $\gamma, f$ ), est observée seulement à haute énergie et pour des noyaux dont la masse est supérieure à celle du plomb. Pour les actinides, cette réaction n'est possible que pour des énergies supérieures à au moins 6 MeV et pour que sa section devienne importante, les photons doivent avoir une énergie de plus de 10 MeV. Elle n'est donc presque jamais observée dans les réacteurs nucléaires. Cette interaction nucléaire est utilisée pour la caractérisation de déchets nucléaires par méthode non destructive[2]. En irradiant des fûts de déchets avec des photons très énergétiques et en mesurant le spectre

de  $\gamma$  retardés résultant de la photofission des actinides, il est possible de déduire les proportions relatives de plutonium et d'uranium.

Une dernière interaction n'est pas prise en compte. Il s'agit de l'effet Delbrück[30] qui correspond à la diffusion élastique des photons sur le noyau. Cette réaction n'apparaît que pour les énergies supérieures à 6 ou 7 MeV. Bien que des photons d'une telle énergie soient présents dans les réacteurs nucléaires, cette interaction reste cependant marginale en comparaison de l'effet de création de paire.

### III.4.ii Bibliothèque de stockage des facteurs de KERMA photonique

Nous avons vu dans ce chapitre que toutes les données relatives aux interactions photo-atomiques sont disponibles dans la bibliothèque EPDL97. Celle-ci contient les sections efficaces totales des différentes interactions photo-atomiques (dont les sections partielles de l'effet photo-électrique) ainsi que les facteurs de forme nécessaires aux expressions des sections de diffusion. Cette bibliothèque contient également les spectres d'émissions électroniques et photoniques associés à chacune des interactions mentionnées. Par conséquent, elle contient toutes les informations nécessaires au calcul du KERMA  $\gamma$ .

Cependant, il existe une seconde bibliothèque de référence qui est spécialisée dans le calcul du KERMA  $\gamma$ . Cette bibliothèque ne contient pas les sections photo-atomique ni les facteurs de KERMA. Elle donne une quantité notée  $\left(\frac{\mu_{tr}}{\rho}\right)_i(E)$  que l'on appelle coefficient de

transfert d'énergie massique des photons[31]. Cette quantité est obtenue en mesurant la somme des énergies produites dans un milieu exposé aux rayonnements ionisants. Elle ne nécessite donc pas de connaître la nature des interactions subies par le milieu comme c'est le cas pour la définition des facteurs de KERMA. Nous donnons la relation entre le coefficient de transfert massique et les facteurs de KERMA :

$$\left(\frac{\mu_{tr}}{\rho}\right)_i(E) = \frac{1}{E} \cdot \frac{N_A}{M_i} \sum_j k_{i,j}(E)$$

Avec :

- $E$  l'énergie du photon incident,
- $N_A$  le nombre d'Avogadro,
- $M_i$  la masse molaire de l'atome  $i$  considéré.

Le KERMA total s'écrit donc :

$$K_\gamma = \int_{E_\gamma} \phi(E_\gamma) \cdot \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho}\right)_{mat} \cdot E_\gamma dE_\gamma$$

$$\left(\frac{\mu_{tr}}{\rho}\right)_{mat} = \sum_i \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho}\right)_i \cdot \omega_i$$

Où  $\omega_i$  est la fraction massique de l'atome  $i$  dans le matériau considéré.

Il existe une autre quantité notée  $\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_i(E)$  appelée coefficient d'absorption massique.

Parmi les interactions subies par les électrons, l'une d'elle est créatrice de photon. Il s'agit du rayonnement de freinage dont nous donnerons plus de détail ultérieurement. Le coefficient d'absorption massique prend en compte la fraction d'énergie cédée aux électrons qui sera ensuite rétrocédée au rayonnement photonique. Cette quantité se déduit du coefficient de transfert d'énergie massique auquel on applique un facteur correctif noté  $g$ :

$$\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_i(E) = \left(\frac{\mu_{tr}}{\rho}\right)_i(E) \cdot (1 - g)$$

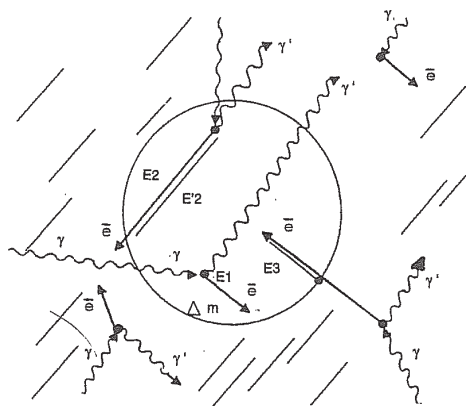
Cette correction est complexe à calculer car elle dépend notamment de la géométrie du problème considéré. Cependant, elle ne devient prépondérante que pour des énergies de photons élevées. Par exemple, dans un bloc de fer,  $g=0.06$  pour les photons de 5 MeV. Il est donc légitime d'utiliser le coefficient de transfert d'énergie massique pour estimer le KERMA photon.

### III.4.iii Limitation du KERMA pour l'estimation de l'énergie déposée localement, notion de dose déposée

Nous avons expliqué au début de ce chapitre que le KERMA est un estimateur de l'énergie déposée localement dans les matériaux. Comme tout estimateur, cette quantité doit donc être utilisée pour un domaine de validité précis. Les différences entre la dose et le KERMA photonique sont très bien expliquées dans la référence [32]. Une partie des figures qui suivront dans ce chapitre sont tirées de cette référence.

En réalité, l'échauffement nucléaire n'est rien d'autre qu'une augmentation du niveau d'équilibre de l'agitation thermique des électrons. Le neutron et le photon ne sont donc pas les véritables vecteurs de l'énergie déposée comme cela est implicitement supposé dans l'expression du KERMA. Par conséquent, lorsque le transport des électrons influe fortement sur l'échauffement local, le KERMA devient un mauvais estimateur de l'énergie déposée. L'énergie déposée dans la matière doit donc être estimée à travers la dose, qui correspond à l'énergie déposée par les électrons dans la matière.

La Figure III-6 illustre la nature du KERMA photonique par rapport à la dose. On considère un volume élémentaire de masse  $\Delta m$ . Un photon interagit dans ce volume et crée deux électrons d'énergie  $E_1$  et  $E_2$ . L'électron d'énergie  $E_2$  transmet une partie de son énergie à la matière notée  $E_2'$  avant de sortir du volume élémentaire. D'un point de vue KERMA, l'énergie déposée par ce photon est donc  $E_2$  alors que pour la dose, l'énergie réellement déposée dans le volume par ce photon est  $E_2'$ . De même, un autre photon interagit hors du volume élémentaire, mais l'électron émis pénètre lui dans le volume et y dépose une énergie  $E_3$ . D'un point de vue KERMA, aucune énergie n'est déposée alors que du point de vue de la dose, l'énergie  $E_3$  a été déposée.



**Figure III-6 Illustration de la différence entre le KERMA et la dose photoniques**

Cette illustration met en évidence les différences sur les quantités estimées par la dose et le KERMA. Pour utiliser le KERMA comme estimateur de l'énergie déposée, il est important de s'assurer qu'au préalable, il tend vers la même valeur que la dose.

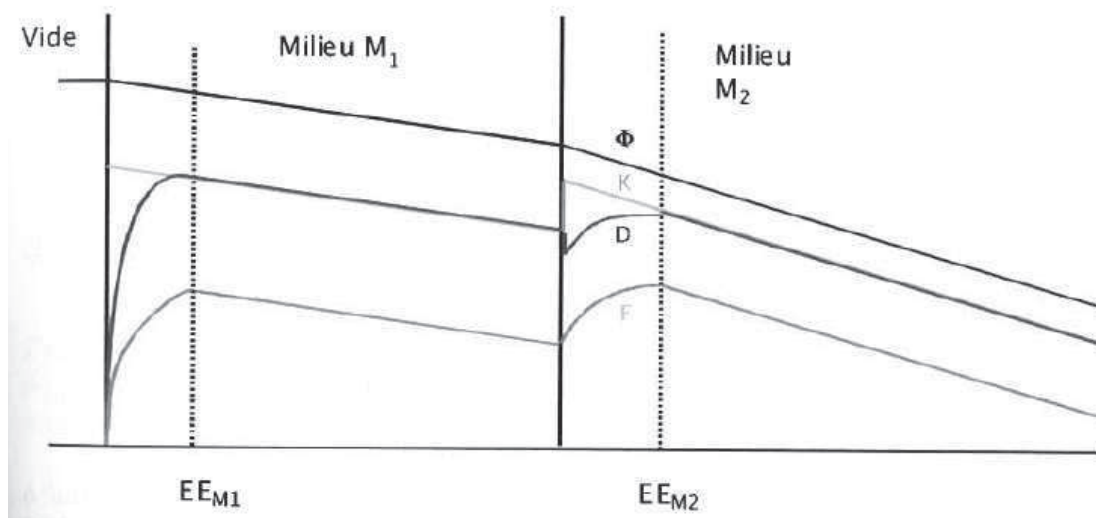


### III.4.iii.a Notion d'équilibre électronique

Le KERMA photon peut être considéré comme égal à la dose uniquement si les conditions d'équilibre électronique sont vérifiées. Cette condition signifie que dans un volume élémentaire correspondant à la maille élémentaire de calcul, le courant d'électrons sortants est identique au courant d'électrons entrants. Cette condition est vérifiée lorsque le point de calcul se situe loin de l'interface entre deux matériaux<sup>19</sup>.

Pour pouvoir expliquer ce phénomène, il faut savoir que la portée des électrons n'est au maximum que de quelques millimètres alors que le libre parcours moyen des photons atteint plusieurs centimètres. A énergie équivalente, la différence entre les trajets moyens parcourus par les photons et les électrons est d'au moins un ordre de grandeur. Par conséquent, sur une distance correspondant à la portée maximale des électrons, l'atténuation du flux photonique est presque nulle. Dans une sphère dont le rayon est la portée maximale des électrons, on peut donc considérer que le flux photonique est invariant. Les taux de réactions et les sources électroniques sont donc les mêmes en tout point de cette sphère. Le point situé au centre se trouve donc à l'équilibre électronique puisqu'il émet la même source électronique que tous les points situés autour de lui. On considère un volume élémentaire  $dV$  contenant ce point central. Les courants électroniques entrant et sortant de ce volume sont égaux.

A l'interface entre deux matériaux, l'équilibre électronique n'est plus vérifié. En effet, même si le flux photonique dans les deux matériaux n'est pas très différent, les sections efficaces et par conséquent les taux de réactions et les sources électroniques ne sont plus identiques en tous points de la sphère définie précédemment. La source électronique dans le matériau le plus dense en électron sera plus intense. Par conséquent, si le point de calcul est situé dans le matériau le plus dense, le KERMA surestimera la dose alors que si le point de calcul est situé dans le matériau le plus léger, le KERMA sous-estimera la dose. La Figure III-7 représente le KERMA et la dose déposée à l'interface entre deux matériaux. Nous pouvons voir qu'à proximité de l'interface entre les milieux 1 et 2, le KERMA et la dose sont différents. Ce n'est qu'à partir d'une certaine distance que l'équilibre électronique est atteint et que le KERMA et la dose ont la même valeur.



**Figure III-7 Représentation du KERMA, de la dose, du flux photonique et de la fluence électronique à l'interface entre deux matériaux**

Certaines techniques de mesure de l'échauffement photonique passent par l'introduction de très petits instruments (de l'ordre de quelques  $\text{mm}^3$ ) dans un matériau.

<sup>19</sup> Loin signifie à une distance supérieure à la portée des électrons



C'est le cas des TLD (détecteur thermo-luminescent) dont nous parlerons ultérieurement. Dans ces volumes, l'équilibre électronique n'est pas vérifié et la contribution majoritaire à la dose déposée provient des électrons du matériau environnant qui sont éjectés lors des interactions photo-atomiques. L'interprétation de ce type de mesure ne doit donc absolument pas être effectuée à travers un calcul de KERMA.

#### III.4.iii.b Calcul de la dose déposée

Le calcul de la dose déposée fait appel au transport des électrons. Les sources électroniques, qui sont créées lors des interactions photo-atomiques, sont bien connues et tabulées dans la bibliothèque EPDL97.

Le transport des électrons est un processus beaucoup plus complexe que le transport de particule neutre. On peut distinguer 3 types d'interactions entre les électrons et la matière :

- La diffusion élastique est une interaction de l'électron avec le noyau de l'atome conduisant à sa déviation. L'électron ne perd pas d'énergie suite à cette interaction.
- La diffusion inélastique est un processus durant lequel l'électron cède une partie de son énergie à un électron du cortège électronique d'un atome. On peut distinguer deux types de diffusions inélastiques en fonction de l'énergie de l'électron incident. Si celui-ci a une énergie suffisante alors l'électron diffusant acquiert une énergie suffisamment élevée pour être éjecté de son cortège électronique. L'atome a été ionisé. Dans le cas contraire, l'atome se retrouve dans un état excité. Ces deux types de diffusion inélastique ne sont pas toujours traités de la même manière par les codes de transport.
- Le Bremsstrahlung est le ralentissement d'une particule chargée par émission radiative. L'électron est dévié par le champ coulombien induits par les électrons ou le noyau des atomes du milieu traversé. Cette décélération conduit à l'émission d'un rayonnement de freinage constitué de photons. Contrairement aux deux interactions précédentes, le rayonnement de freinage est une interaction que l'électron subit en continu puisque le champ coulombien est situé en tout point d'un matériau.

Les données associées à toutes ces interactions sont disponibles dans une bibliothèque connexe à EPDL97 qui se nomme EEDL[33]. Les sections efficaces prennent des valeurs très élevées ( $>10^7$  barns pour la diffusion inélastique sur le fer d'un électron de 100 keV) tandis que les pertes d'énergies à chaque choc sont faibles ( $\sim 100$  eV pour un électron de 100 keV subissant une diffusion inélastique sur un atome de fer). Cela signifie qu'un électron effectuera un très grand nombre de chocs avant d'atteindre l'équilibre thermique. C'est ce que nous avons déjà expliqué dans le chapitre 1.

Pour estimer l'énergie déposée par les électrons, on utilise une quantité que l'on nomme pouvoir d'arrêt [34] qui représente la perte d'énergie par unité de longueur. Elle est exprimée en  $\text{MeV.cm}^{-1}$  et a pour expression :

$$S = \left( \frac{dE}{dx} \right)$$

Cette quantité n'est pas spécifique aux électrons. Elle est également utilisée pour le calcul des énergies déposées des particules chargées plus lourdes (proton,  $\alpha$ , ions lourds, ...).

Dans le cas des électrons, on scinde cette quantité en deux termes correspondant aux collisions et aux rayonnements de freinage. On définit ainsi le pouvoir d'arrêt massique total :

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{total} = \left(\frac{S}{\rho}\right)_{collision} + \left(\frac{S}{\rho}\right)_{freinage}$$

Si la longueur parcourue par un électron est connue, alors l'énergie perdue par un électron sera déduite de la valeur :

$$\Delta E = \rho \int_0^l \left(\frac{S}{\rho}\right)(x) dx$$

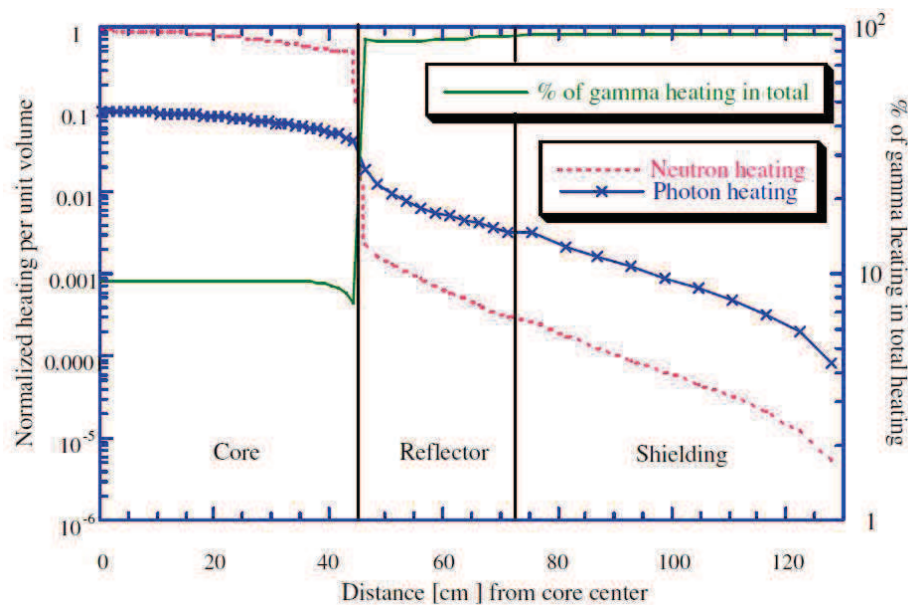
On peut approximer cette valeur par :

$$\Delta E = \rho \left(\frac{S}{\rho}\right) l$$

### III.5 Composantes neutroniques et photoniques de l'échauffement dans un réacteur nucléaire

Dans un réacteur nucléaire, la puissance thermique totale est majoritairement due à l'énergie produite lors de la fission neutronique de  $^{235}\text{U}$  ou du  $^{239}\text{Pu}$ . Le noyau fissionnant dépend du type de combustible contenu dans les crayons. Par conséquent, sur l'ensemble d'un réacteur nucléaire, le KERMA neutron représente environ 90% du KERMA total déposé dans les matériaux. Ce résultat global n'est pas nécessairement observé localement.

Dans la maquette critique MASURCA du CEA Cadarache, dans une configuration nommée ZONA2B, il a été montré que l'échauffement dans les régions non-combustibles étaient à plus de 90% dû aux photons. Dans les régions contenant du combustible ce rapport s'inversait et l'échauffement dû aux neutrons devenait dominant. Ces calculs ont été effectués durant la thèse d'Anton Lüthi qui a été soutenue en 1998 [36]. Les résultats sont décrits sur la Figure III-8 qui est directement tirée de son manuscrit de thèse.



**Figure III-8 Echauffements photoniques et neutroniques dans les différents matériaux de la maquette critique MASURCA dans la configuration ZONA2B**

MASURCA [37] est une maquette critique caractéristique des réacteurs à neutrons rapides. Nous avons effectué deux nouveaux calculs dans des géométries critiques fonctionnant avec des neutrons thermiques. Ces calculs ont été effectués avec le code TRIPOLI4. Les deux géométries simulées sont :

- Un cas simple constitué d'une cellule contenant un crayon combustible gainé dans de l'eau modératrice,
- Un cas plus complexe correspondant à une configuration de la maquette critique EOLE.

Dans les deux sous-parties suivantes, nous donnons les résultats des calculs, nous détaillerons la méthode exacte employée ultérieurement dans ce document.

### III.5.i Echauffements relatifs dans une cellule d'un réseau de crayon combustible

Nous avons calculé les énergies photoniques et neutroniques déposées dans les différents matériaux composant une cellule de crayon combustible. Celle-ci est constituée d'un crayon de hauteur infini dont la gaine est en zircaloy. Ce crayon contient des pastilles de type UOx enrichies en  $^{235}\text{U}$  à 3.7%. Ces crayons ont un burn-up de  $30000 \text{ MWj.t}^{-1}$ . Les compositions exactes du combustible ont été obtenues à partir d'un calcul APOLLO2 en évolution. Comme le but du calcul est principalement d'obtenir un ordre de grandeur de l'énergie déposée et non pas des valeurs exactes, nous ne nous attarderons pas sur les compositions exactes de chacun des éléments.

Les résultats obtenus sont donnés dans le Tableau 1. Les valeurs sont données en % et sont normalisées à l'énergie totale déposée par les neutrons et les photons dans tous les matériaux de la cellule. Le dépôt photon total est la somme des dépôts photons prompts et retardés.

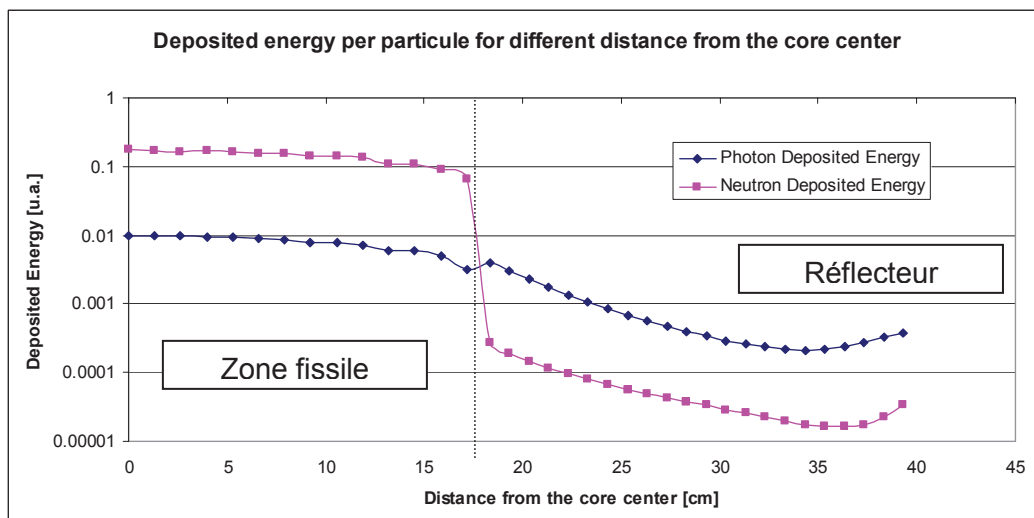
**Tableau 1 Energie déposée dans les différents matériaux d'une cellule d'un réseau de crayon combustible**

REP	Dépôt neutron	Dépôt photon			Dépôt total
		Prompt	Retardé	Total	
<b>Combustible</b>	88.24	6.06	2.44	8.50	96.74
<b>Gaine</b>	0.01	0.63	0.22	0.86	0.87
<b>Modérateur</b>	1.80	0.44	0.15	0.59	2.39
<b>Somme</b>	90.05	7.13	2.82	9.95	100.00

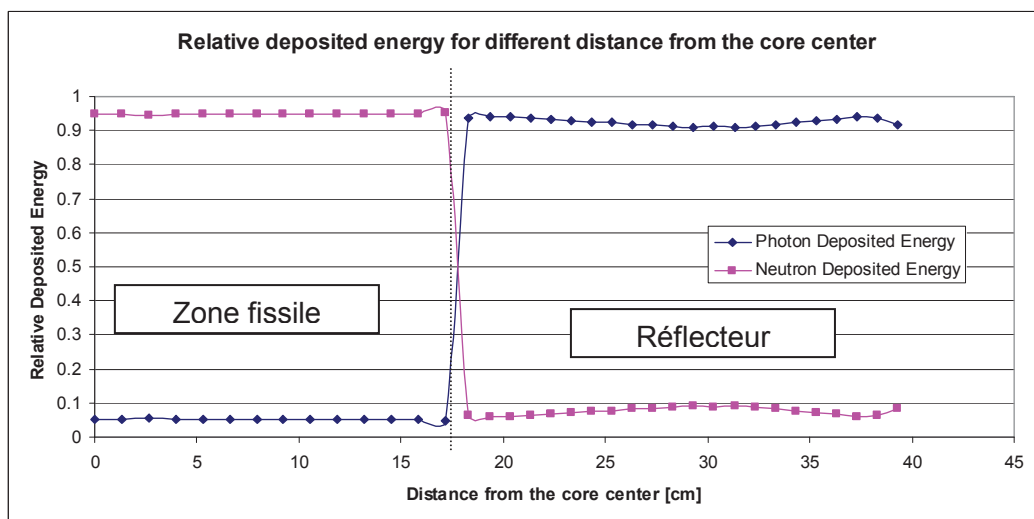
Nous constatons que dans le combustible, 90% de l'énergie déposée est due aux neutrons par l'intermédiaire de la fission. Dans le modérateur, la composante neutronique de l'énergie déposée est également majoritaire. D'après la formule du facteur de KERMA définie au paragraphe III.3.ii, l'énergie du noyau de recul de l'hydrogène par diffusion élastique peut être égale à celle du neutron incident. C'est pourquoi le KERMA neutron est si élevé dans le modérateur. Dans la gaine, principalement composée de noyaux de zirconium, le KERMA déposé par diffusion neutronique est beaucoup plus faible. C'est pourquoi le dépôt d'énergie des photons représente plus de 90% de l'énergie totale déposée.

### III.5.ii Echauffements relatifs dans une maquette critique

Le même calcul a été effectué dans la géométrie correspondant à une expérience critique constituée d'un réseau de crayons combustibles entouré d'un réflecteur en acier. Cette expérience sera détaillée ultérieurement dans ce manuscrit. L'énergie déposée par les neutrons et les photons a été calculée dans le combustible ainsi que dans l'acier du réflecteur. Les résultats sont représentés sur les Figure III-9 et Figure III-10.



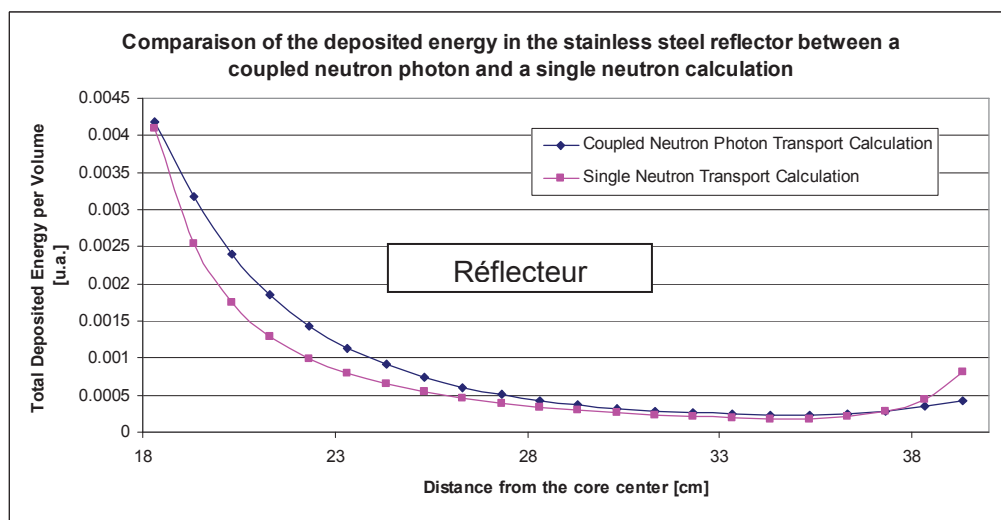
**Figure III-9** Energie absolue déposée par les neutrons et les photons dans un cœur avec réflecteur en fonction de l'emplacement



**Figure III-10** Energie déposée relative à l'énergie totale déposée par les neutrons et les photons dans un cœur avec réflecteur en fonction de l'emplacement

Les résultats obtenus sont similaires à ceux observés avec le cœur ZONA2B. L'énergie déposée par les neutrons est majoritaire dans le combustible, mais dans le réflecteur, la tendance s'inverse et plus de 95% de l'énergie déposée est due aux photons. Nous pouvons tout de même constater qu'en absolu, la majorité de l'énergie est déposée dans la zone fissile par l'intermédiaire de la fission.

Nous avons également effectué le calcul de l'énergie totale déposée localement dans cette géométrie en ne simulant que les neutrons. Dans l'expression du facteur de KERMA par la méthode du bilan énergétique, le terme d'énergie  $\gamma$  est alors supprimé. Des réactions comme la fission et la capture radiative déposeront leurs énergies  $\gamma$  localement sans les transporter. Les résultats de ce calcul par rapport à un calcul couplé neutron-photon sont représentés sur la Figure III-11.



**Figure III-11 Comparaison de l'énergie déposée dans un réflecteur en acier entre un calcul couplé neutron-photon et un calcul non couplé neutron**

Nous pouvons constater que l'énergie déposée dans les premiers centimètres du réflecteur est très fortement sous-évaluée (jusqu'à -30%) lorsque les photons ne sont pas simulés. Les photons de fission qui devraient normalement être transportés jusque dans le réflecteur et y déposer leurs énergies ne sont pas comptabilisés. Cela confirme l'importance du transport des photons dans l'estimation de l'énergie déposée dans les matériaux de structure.

### III.5.iii Conclusion

D'après ces trois calculs, il est possible de déduire certaines conclusions. Dans la zone fissile des réacteurs nucléaires, la composante photonique de l'échauffement total est largement minoritaire tandis que dans les matériaux de structure tels que l'acier d'un réflecteur ou l'acier de cuve, alors l'échauffement photonique devient prédominant.

L'irradiation photonique ne contribue presque pas au vieillissement des matériaux dans le sens où l'énergie cédée au noyau de recul est trop faible pour créer un pka tel que défini dans le chapitre 2. Cependant, d'un point de vue échauffement nucléaire, cette contribution n'est pas négligeable et peut induire une élévation locale de la température des matériaux qui, si elle n'est pas maîtrisée altère leurs propriétés mécaniques.

Pour garantir la sûreté d'un réacteur nucléaire en fonctionnement, il est donc indispensable de pouvoir calculer le plus précisément possible l'échauffement dû aux photons dans les matériaux de structure. Plus l'incertitude associée au résultat de ce calcul est élevée, plus les marges de sécurité sont contraignantes pour le constructeur et l'exploitant de la centrale nucléaire.

Le calcul de l'échauffement photonique fait appel à de nombreux outils dont des bibliothèques de données nucléaires et atomiques ainsi que des codes de calculs. L'estimation de l'incertitude sur le calcul de l'échauffement photonique passe donc par la vérification de la qualité de ces outils.

Ainsi dans la suite de ce document, nous vérifierons la pertinence des données de production photonique contenue dans les bibliothèques de données nucléaires usuelles. Ensuite nous effectuerons une qualification du code de transport Monte Carlo TRIPOLI4. Nous terminerons par la validation du code de transport déterministe APOLLO2 par rapport à TRIPOLI4 et nous finirons par sa qualification.

## Chapitre IV Analyse critique des données nucléaires disponibles dans les bibliothèques pour les calculs d'échauffement photonique

Pour calculer l'échauffement photonique dans un matériau, il est nécessaire de résoudre l'équation du transport photonique afin d'en déduire le flux. Dans cette équation, le terme de source est lié aux transports des neutrons. Ainsi, certaines réactions neutroniques induisent la création d'un ou plusieurs photons répartis selon un spectre énergétique donné. Les sources photoniques créées en tout point du réacteur peuvent ainsi s'écrire :

$$S_{\gamma,tot}(E_{\gamma}, \vec{r}) = \int_0^{E_{max}} \sum_i \Sigma_i(E_n, \vec{r}) \phi(E_n, \vec{r}) \cdot S_{\gamma,i}(E_n, E_{\gamma}) dE_n$$

Avec :

- $S_{\gamma,tot}$  et  $S_{\gamma,i}$  les sources d'émission photonique totale et associée à la réaction  $i$ ,
- $\Sigma_i$  est la section efficace macroscopique de la réaction  $i$ ,
- $\phi$  est le flux neutronique.

Ces sources sont dites promptes car elles sont créées aux moments où la réaction nucléaire a lieu. Il existe un autre type de sources photoniques dites retardées. Elles sont également créées lors des réactions nucléaires mais, contrairement aux sources promptes, les photons sont émis en différé. Après quelques jours de fonctionnement, un réacteur nucléaire est à l'équilibre vis à vis de ces sources retardées. Dans ce cas, l'expression de la source retardée est identique à celle de la source prompte telle que décrite dans l'équation précédente.

Les sources photoniques promptes et retardées associées aux réactions nucléaires sont disponibles dans les bibliothèques de données nucléaires de référence présentées dans le chapitre 1. Dans cette partie, nous effectuons une analyse critique de ces données. La majorité des données présentes dans ce chapitre sont tirées de la référence[35].

### IV.1 Rappel sur le format ENDF

Les bibliothèques de données nucléaires sont constituées de fichiers au format ASCII dont la taille peut atteindre plusieurs dizaines de milliers de lignes. Toutes les informations y sont tabulées selon un format bien précis correspondant aux règles d'écriture édictées pour le format ENDF[37]. Cette sous-partie est un rappel de la nomenclature du format ENDF. Celle-ci sera utilisée dans le reste du chapitre afin de localiser les quantités d'intérêt pour les sources photoniques.

Les différentes données contenues dans les fichiers d'évaluation au format ENDF sont classées selon deux grandeurs : MF et MT. Le nombre MF indique le type de donnée (spectre, section efficace neutronique, section efficace photonique, donnée générale, ...). Le nombre MT indique le type de réaction (diffusion élastique ou inélastique, fission, effet photoélectrique, ...) ou certaines données propres au noyau (période, spectre de désintégration radioactive, énergie dégagée suite à une fission, ...). Nous avons représenté sur la Figure IV-1, un extrait des données relatives à la fission de  $^{235}\text{U}$  dans la bibliothèque JEFF-3.1.1.





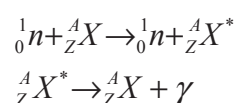
- MT3 : Combinaison de toutes les réactions nucléaires possibles à l'exception de la diffusion élastique. Cette réaction est rarement utilisée pour les noyaux usuels. Elle est parfois associée à une MF13. Cette combinaison permet alors de décrire les sources  $\gamma$  d'un noyau sans devoir distinguer une à une chaque réaction.
- MT4 : Combinaison de toutes les réactions de diffusion inélastique. Comme pour MT3, cette réaction est parfois associée à une MF13.
- MT5 : Combinaison de toutes les réactions qui ne sont pas traitées dans une autre MT. Comme pour MT3, cette réaction est parfois associée à une MF13.
- MT18 : Réaction de fission.
- MT50+i<41 : Diffusion inélastique sur le  $i^{\text{ème}}$  niveau discret. Les spectres d'émission associés sont discrets et ne sont donc jamais décrits en MF15.
- MT91 : Diffusion inélastique dans le continuum. Les spectres d'émission sont au moins en partie continus. Ils peuvent donc être décrits en MF15.
- MT102 : Capture radiative. La plupart du temps, les spectres d'émission  $\gamma$  résultants sont traités de manière continue dans les évaluations. En réalité, ces spectres peuvent très bien être discrets.
- MT451 : Cf. MF1.
- MT454 : Rendements de fission indépendants. Cette MT ne se trouve qu'en MF8.
- MT457 : Données de désintégration radioactive. On y trouve la période radioactive, les énergies totales dégagées sous forme de particule  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , électrons de conversion, Auger et X ainsi que leurs spectres d'émissions. Cette MT ne se trouve qu'en MF8.
- MT458 : Décomposition de l'énergie relâchée lors de la fission induite par les neutrons. On y trouve entre autres les énergies totales dégagées par les  $\gamma$  prompts et retardés de fission. Cette MT se trouve exclusivement en MF1.
- MT459 : Rendements de fission cumulés. Cette MT ne se trouve qu'en MF8 comme pour les rendements indépendants de fission.

## IV.2 La diffusion neutronique inélastique

La diffusion inélastique est l'une des réactions nucléaires produisant le plus de photons dans un réacteur nucléaire. Dans la partie 3, nous avons brièvement décrit cette réaction d'un point de vue transfert d'énergie au noyau de recul pour l'estimation du KERMA. Dans cette partie, nous commencerons par rappeler le principe de cette réaction du point de vue de l'émission de photons.

### IV.2.i Principe de la diffusion inélastique

Lors de la diffusion inélastique du neutron, une partie de l'énergie du neutron incident est transférée au noyau cible sous forme d'énergie interne. Cette énergie est ensuite dissipée par l'émission d'un ou de plusieurs photons  $\gamma$  ou électrons de conversion. C'est ce que l'on appelle une transition  $\gamma$ . Nous rappelons l'équation caractéristique de la diffusion inélastique qui a déjà été donnée dans le chapitre précédent.

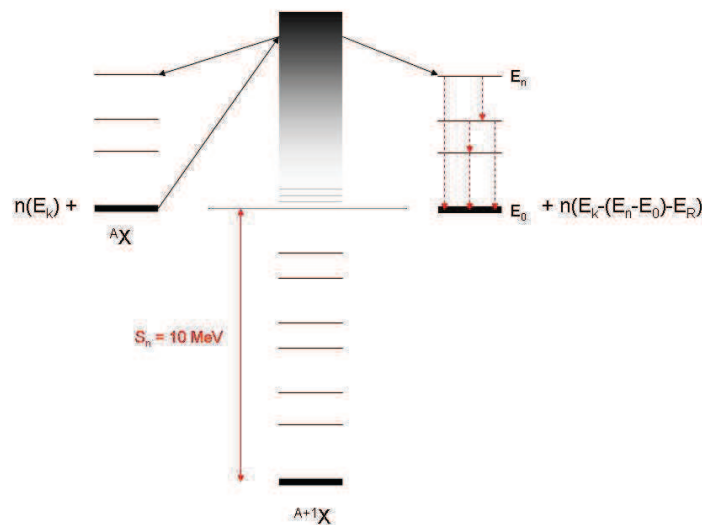


La Figure IV-2 décrit la réaction de diffusion inélastique d'un point de vue structure nucléaire dans le modèle du noyau composé. Nous reviendrons sur ce modèle dans le



prochain chapitre. A gauche se trouve le noyau cible sur lequel un neutron d'énergie  $E_n$  entre en collision. Ce neutron est ensuite absorbé et un noyau composé est créé. Ce noyau se trouve dans un état excité d'énergie :  $S_n + E_n$ . A cette énergie le schéma de niveau du noyau composé n'est plus connu. Son état doit donc être traité de manière statistique. Pour se débarrasser de son surplus d'énergie, le noyau composé émet un nouveau neutron. Le noyau résiduel ainsi obtenu est donc identique au noyau cible initial à la différence qu'une partie de l'énergie du neutron incident a été convertie en énergie interne (ou énergie d'excitation). La relaxation du noyau résiduel peut alors se traiter de deux manières différentes en fonction de l'énergie laissée par le neutron :

- L'énergie interne laissée par le neutron incident correspond à l'énergie d'excitation du  $i$ ème niveau connu du noyau résiduel. On parle alors de la diffusion inélastique sur le  $i$ ème niveau.
- L'état du noyau résiduel n'est pas connu et est traité statistiquement. On parle alors de diffusion sur le continuum.



**Figure IV-2 La diffusion inélastique discrète dans le modèle du noyau composé**

Il existe d'autres modèles de réaction nucléaire plus complexe permettant de décrire la diffusion inélastique. Nous reviendrons dessus dans le prochain chapitre.

#### **IV.2.ii Etat des lieux des spectres $\gamma$ de diffusion inélastique dans JEFF-3.1.1 et dans les autres bibliothèques**

Les photons  $\gamma$  émis par la diffusion inélastique sont en général peu énergétiques ( $<1$  MeV) comparés à ceux émis lors d'autres réactions nucléaires. L'émission peut être anisotrope. Cela a notamment été mis en évidence par Robert B. Day et Martin Walt pour la diffusion inélastique sur le  $^{10}\text{B}$ , le  $^{19}\text{F}$  et le  $^{56}\text{Fe}$  [38]. Actuellement, dans JEFF-3.1.1 et ENDF/B-VII, seules les évaluations du C naturel, de l' $^{14}\text{N}$  et de l' $^{16}\text{O}$  proposent des spectres de production  $\gamma$  anisotropes. Cela n'est pas le cas de JENDL-4.0 qui n'en contient aucun.

Aucune évaluation ne prend en compte la possibilité de produire des électrons de conversion à la place d'un photon lors de la transition  $\gamma$  alors que certaines sont très converties. Cela se retrouve notamment dans le cas du  $^{57}\text{Fe}$ . La transition  $\gamma$  allant du premier niveau excité (14 keV) vers l'état fondamental est convertie à 90%. Or dans les trois bibliothèques JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII.0 et JENDL-4.0, la diffusion inélastique sur le premier niveau excité conduit systématiquement à la création d'un photon  $\gamma$  de 14 keV. D'un point de vue dépôt d'énergie totale, cela n'a pas une grande influence car les photons de 14 keV ont

un libre parcours moyen très faible ( $\sim 10 \mu\text{m}$  dans l'acier). Le dépôt d'énergie reste donc localisé au lieu de collision du neutron incident. Cependant, dans un calcul couplé neutron-photon, le KERMA sera considéré comme déposé par les photons alors qu'en réalité, il est déposé par les neutrons (dernière particule neutre déposant une particule chargée).

Dans la bibliothèque JEFF-3.1.1, certains noyaux possèdent quelques incohérences entre les valeurs des chaleurs de réaction<sup>20</sup> et celles des énergies de transitions discrètes<sup>21</sup>. Les corrections adéquates ont été effectuées par C. Jouanne [40] et ont été prises en compte dans la bibliothèque d'application CEA-v5 [39].

Dans l'annexe A, nous effectuons une liste non exhaustive des données contenues dans la bibliothèque JEFF-3.1.1 en indiquant leurs positions (MF-MT) pour 90 noyaux usuels présents dans les réacteurs nucléaires.

Nous pouvons distinguer 5 noyaux pour lesquels les données de production photon suite à une diffusion inélastique du neutron sont manquantes ; l'Sn, le Gd, l'In, l'Ag et le Cd. Dans la bibliothèque ENDF/B-VII.0, ces données sont présentes pour le Gd et pour l'Ag. Dans JENDL-4.0, tous ces isotopes possèdent des spectres de production  $\gamma$  pour la diffusion inélastique. Nous constatons également que le nombre de niveaux discrets pris en compte est très variable, allant de 2 pour le  $^{64}\text{Ni}$  à 40 pour l' $^{238}\text{U}$ . Nous faisons le même constat dans les deux autres bibliothèques. Cependant, il arrive qu'entre deux bibliothèques, les niveaux pris en compte ne sont pas nécessairement les mêmes. Par exemple, dans JEFF-3.1.1, dans l'évaluation du  $^{112}\text{Cd}$ , le 8<sup>ème</sup> niveau inélastique correspond à une énergie d'excitation de 2.02 MeV tandis que dans JENDL-4.0, celle-ci est de 1.89 MeV. Ces différences ne sont cependant pas observées sur les premiers niveaux excités. Les sections de diffusions inélastiques deviennent très faibles au-delà du deuxième niveau excité.

La bibliothèque JEFF-3.1.1 est actuellement en retard sur les autres bibliothèques du point de vue des sources de photons. Il est donc nécessaire de proposer de nouvelles évaluations contenant les données de production  $\gamma$  manquante.

### IV.3 La fission induite par neutron

Une énergie d'environ 200 MeV est libérée lors de la fission des actinides. La majeure partie correspond à l'énergie cinétique des fragments de fission et des neutrons<sup>22</sup>. Cependant, une part non négligeable de cette énergie est émise sous forme de photon  $\gamma$ . On peut distinguer deux types de photons  $\gamma$  dont l'émission est induite par la fission :

- Les photons prompts qui sont émis lors de la désexcitation des fragments de fission durant les premiers instants suivant la fission<sup>23</sup>,
- Les photons retardés qui sont émis lors de la désintégration radioactive des produits de fission.

#### IV.3.i Etats des lieux des mesures de spectre de $\gamma$ prompts de fission

Les mesures des spectres de l' $^{233}\text{U}$ , de l' $^{235}\text{U}$  et du  $^{239}\text{Pu}$  ont été pour la plupart effectuées dans les années 1970 par trois équipes de recherches [41][42][43][44]. Ces équipes utilisaient des détecteurs de type NaI avec des temps d'acquisition allant de 10 à

---

<sup>20</sup> MF3

<sup>21</sup> MF12

<sup>22</sup>  $170 + 4.8 \text{ MeV}$  dans le cas de la fission de l' $^{235}\text{U}$

<sup>23</sup> Entre  $10^{-14}$  et  $10^{-7}\text{s}$

100 ns après la fission. Nous avons résumé les résultats de ces différentes mesures dans le Tableau IV-1.

**Tableau IV-1 Résumé des différentes mesures de spectres de  $\gamma$  prompts de fission**

Noyau	Intervalle d'énergie [MeV]	Energie totale [MeV]	Multiplicité moyenne	Energie $\gamma$ moyenne [MeV]	Référence
$^{233}\text{U}$	0.14 – 10.0	$6.69 \pm 0.3$	$6.31 \pm 0.95$	$1.04 \pm 0.2$	Pleasanton 1973
$^{235}\text{U}$	0.010 – 10.5	$7.25 \pm 0.26$	$8.13 \pm 0.35$	$0.89 \pm 0.07$	Peelle 1971
	0.14 – 10.0	$7.18 \pm 0.26$	$7.45 \pm 0.32$	$0.96 \pm 0.08$	Peelle 1971
	0.09 – 10.0	$6.43 \pm 0.3$	$6.51 \pm 0.3$	$0.99 \pm 0.09$	Pleasanton 1971
	0.14 – 10.0	$6.51 \pm 0.209$	6.70	$0.97 \pm 0.03$	Verbinski 1973
$^{239}\text{Pu}$	0.14 – 10.0	$6.81 \pm 0.222$	7.23	$0.94 \pm 0.03$	Verbinski 1973
		$6.73 \pm 0.35$	$6.31 \pm 0.95$	$1.06 \pm 0.02$	Pleasanton 1973

Les mesures sont assez dispersées. Pour l' $^{235}\text{U}$ , l'énergie totale émise varie de 0.82 MeV. De plus, les photons de basse énergie ne sont jamais mesurés. Pour les évaluations, il est donc nécessaire d'estimer le spectre d'émission photonique à basse énergie. Il n'existe pas de mesures des spectres de  $\gamma$  prompt de fission pour l' $^{238}\text{U}$  et pour le  $^{241}\text{Pu}$ . Pourtant, leurs fissions ne sont pas négligeables dans les réacteurs à neutrons rapides comme thermiques et doivent être prises en compte. D'autres mesures de spectres  $\gamma$  sont régulièrement effectuées sur la fission spontanée du  $^{252}\text{Cf}$ .

Depuis quelques années, de nouvelles campagnes de mesure de spectre  $\gamma$  de fission sont en cours, notamment dans le réacteur expérimental de Budapest[45] et aux Etats-Unis[46]. Les premiers résultats ont déjà été publiés. De plus, de nombreux laboratoires travaillent actuellement à la modélisation des phénomènes de fission. Un code d'évaporation nucléaire nommé FIFRELIN<sup>24</sup> est notamment en cours de développement au CEA Cadarache[47].

#### IV.3.ii Les données nucléaires dans les bibliothèques

##### IV.3.ii.a $\gamma$ prompts de fission

Les données relatives aux  $\gamma$  prompts de fission se trouvent dans les bibliothèques de données nucléaires. Nous pouvons trouver les énergies totales émises sous forme de  $\gamma$  prompts et retardés ainsi que leurs spectres et leurs multiplicités. Les Figure IV-3, Figure IV-4, Figure IV-5, Figure IV-6 et Figure IV-7 représentent les spectres d'émission des  $\gamma$  prompts de fission des trois bibliothèques JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII.0 et JENDL-4.0 pour différents actinides.

<sup>24</sup> Fission Fragment Evaporation Leading to an Investigation of Nuclear data

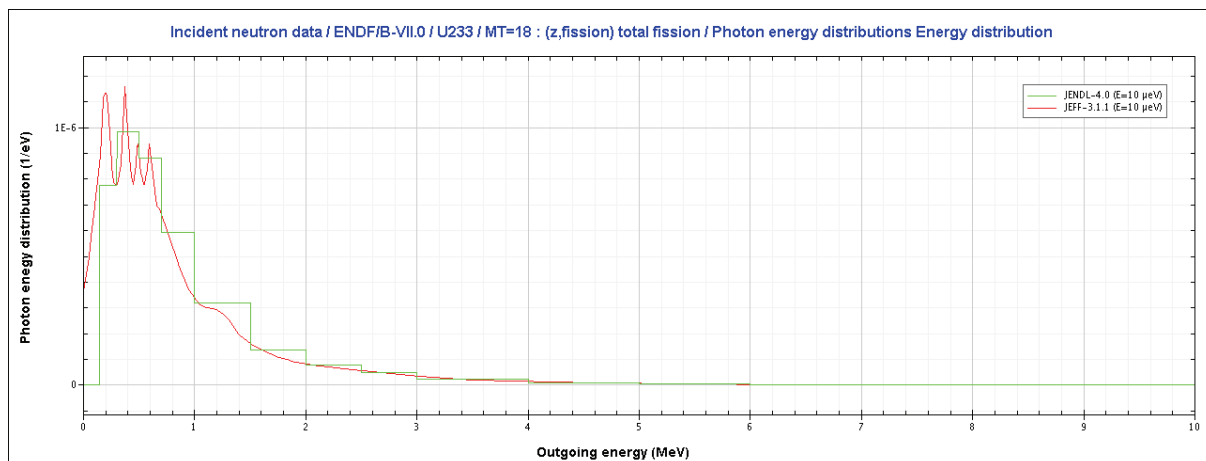


Figure IV-3 Spectres d'émission des  $\gamma$  prompts de fission de  $^{233}\text{U}$  des bibliothèques JEFF-3.1.1 (=ENDF/B-VII) et JENDL-4.0

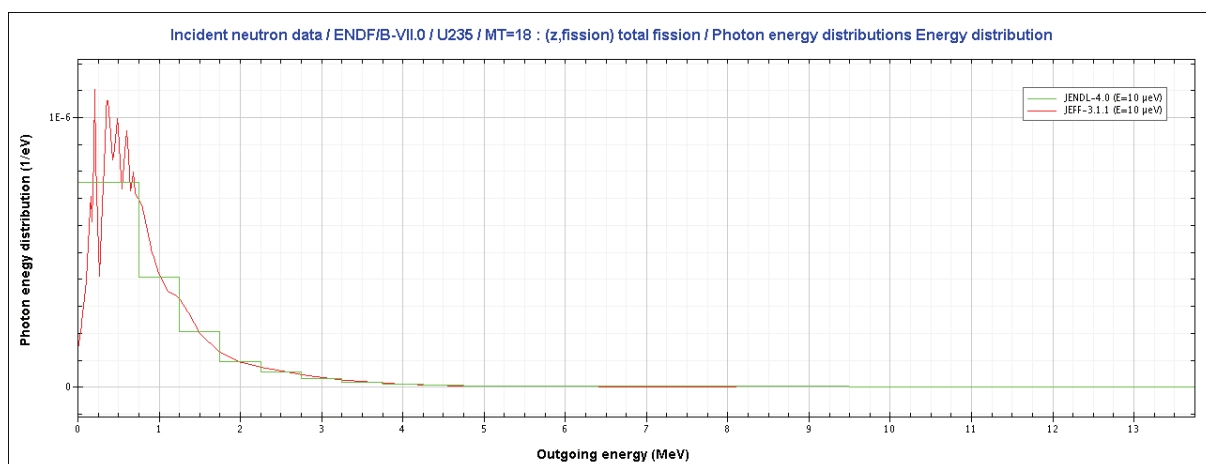


Figure IV-4 Spectres d'émission des  $\gamma$  prompts de fission de  $^{235}\text{U}$  des bibliothèques JEFF-3.1.1 (=ENDF/B-VII) et JENDL-4.0

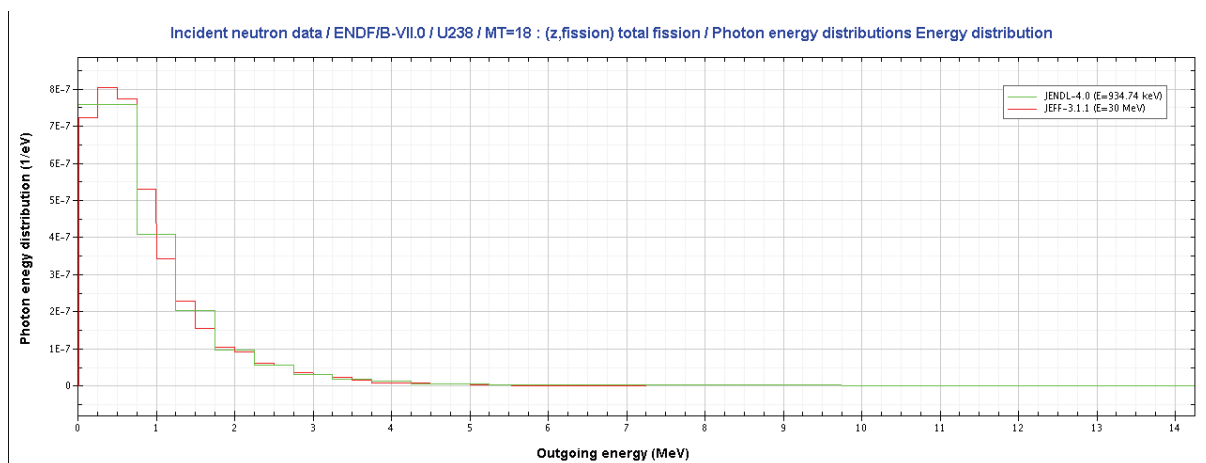


Figure IV-5 Spectres d'émission des  $\gamma$  prompts de fission de  $^{238}\text{U}$  des bibliothèques JEFF-3.1.1 (=ENDF/B-VII) et JENDL-4.0

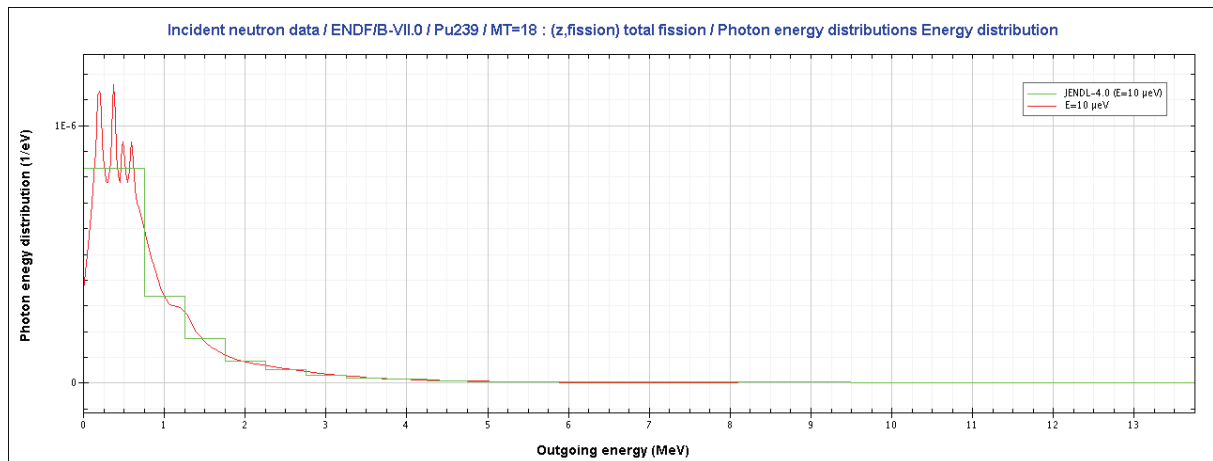


Figure IV-6 Spectres d'émission des  $\gamma$  prompts de fission du  $^{239}\text{Pu}$  des bibliothèques ENDF/B-VII et JENDL-4.0

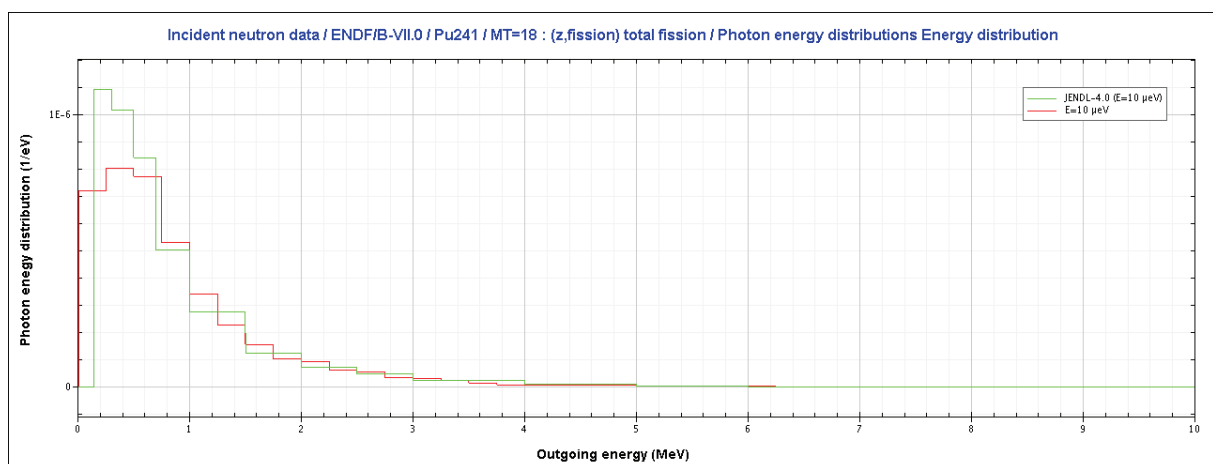


Figure IV-7 Spectres d'émission des  $\gamma$  prompts de fission du  $^{241}\text{Pu}$  des bibliothèques ENDF/B-VII et JENDL-4.0

Dans les trois bibliothèques, ces spectres sont tirés des mesures de Verbinski. Ils sont systématiquement considérés comme indépendants de l'énergie du neutron incident. Les spectres associés aux trois isotopes de l'uranium des bibliothèques ENDF/B-VII.0 et JEFF-3.1.1 sont parfaitement identiques et suivent les recommandations de L. Stewart et R. Hunter[48]. Celles-ci consistent entre autres à interpoler linéairement les mesures de Verbinski entre 0 et 0.14 MeV. Contrairement à ENDF/B-VII.0, JEFF-3.1.1 ne contient aucun spectre pour les deux isotopes impairs du Pu. Nous pouvons remarquer que les spectres normalisés de  $^{233}\text{U}$  et du  $^{239}\text{Pu}$  ainsi que ceux de  $^{238}\text{U}$  et du  $^{241}\text{Pu}$  sont deux à deux identiques dans la bibliothèque ENDF/B-VII.0. Seules les multiplicités sont différentes. Nous pouvons faire le même constat avec la bibliothèque JENDL-4.0 pour d'autres couples de noyaux. Cette redondance est imposée par l'absence de mesures des spectres de fission pour tous les noyaux fissionnant. Les évaluateurs n'ont pas d'autres choix que d'extrapoler la forme des quelques spectres de fission mesurés à tous les noyaux fissiles.

L'énergie totale émise par les  $\gamma$  prompts de fission peut être obtenue de deux manières différentes à partir des bibliothèques de données nucléaires :

- Elles sont tabulées<sup>25</sup>.

<sup>25</sup> MF1-MT458

- Elles peuvent être calculées en intégrant le spectre d'émission  $\gamma$  de fission pondéré par sa multiplicité.

Dans le Tableau IV-2, nous vérifions la cohérence entre ces deux valeurs pour 5 noyaux fissionnant. L'énergie du spectre  $\gamma$  intégré a été calculée grâce au code PSYCHE[49].

**Tableau IV-2 Comparaison des données JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII.0 et JENDL-4.0 relatives aux énergies  $\gamma$  de fission**

Noyau	Energie totale $\gamma$ [MeV]		Multiplicité $\gamma$ prompte	Spectre $\gamma$ prompt Intégré [MeV]	Evaluation
	prompte	retardée			
$^{233}\text{U}$	7.72±0.52	5.01±0.06	6.31	5.47	JEFF-3.1.1
	7.72±0.52	5.01±0.06	6.31	5.47	ENDF.B-VII.0
	7.736	5.235	7.95	7.736	JENDL-4.0
$^{235}\text{U}$	6.97±0.5	6.33±0.05	7.17	6.72	JEFF-3.1.1
	6.60±0.5	6.33±0.05	7.04	6.60	ENDF.B-VII.0
	6.997	6.373	7.43	6.957	JENDL-4.0
$^{238}\text{U}$	6.53±0.53	8.25±0.04	8.18	7.254	JEFF-3.1.1
	6.68±0.53	8.25±0.04	7.533	6.68	ENDF.B-VII
	6.547	7.883	6.447	6.221	JENDL-4.0
$^{239}\text{Pu}$	6.75±0.47	5.17±0.06	Absence de spectre		JEFF-3.1.1
	6.74±0.22	5.17±0.06	7.783	6.74	ENDF.B-VII.0
	6.754	5.32	8.389	7.45 ( $E_n < 0.2$ MeV)	JENDL-4.0
				7.16 ( $E_n > 4$ MeV)	
$^{241}\text{Pu}$	7.64±0.69	6.4±0.09	Absence de spectre		JEFF-3.1.1
	7.64±0.69	6.4±0.09	8.18	7.26	ENDF.B-VII.0
	7.626	6.373	8.1032	7.626	JENDL-4.0

A priori, la valeur de l'énergie prompte totale tabulée devrait être identique à celle du spectre intégré. Ce n'est jamais le cas dans JEFF-3.1.1 et ce n'est pas automatique pour les deux autres bibliothèques. Cette différence vient du fait que ces deux valeurs proviennent d'expériences et de calculs différents. La cohérence n'a pas systématiquement été vérifiée. La stratégie d'ENDF/B-VII lors du passage de la version VI à la version VII a été d'ajuster les multiplicités  $\gamma$  afin d'égaliser ces deux valeurs. De plus, l'énergie émise a été réévaluée en se basant sur les recommandations de Madland[50]. Il conviendrait de faire la même chose pour la prochaine version de la bibliothèque JEFF. De plus, le problème des spectres de fission manquants dans JEFF-3.1.1 pour le  $^{239}\text{Pu}$  et le  $^{241}\text{Pu}$  peut être aisément résolu en prenant tout simplement les spectres contenus dans JENDL-4.0 ou dans ENDF/B-VII.0. C'est ce qui a été retenu pour la prochaine version de la bibliothèque JEFF. Ceux-ci sont tous deux tirés de mesures de référence, par conséquent ils sont très pertinents et ne

nécessitent pas d'amélioration particulière. Dans la bibliothèque d'application CEA5[39], cette solution a déjà été mise en œuvre.

#### IV.3.iii $\gamma$ retardés de fission

Les produits de fission sont pour la plupart radioactifs et émettent des photons  $\gamma$  lors de leurs désintégrations. Dans JEFF-3.1.1, la fission induite par neutron thermique de  $^{235}\text{U}$  conduit à la formation de 977 produits de fission différents. Parmi eux, on trouve les noyaux d'hydrogène, d'hélium ainsi que les autres éléments légers issus de la fission ternaire. En moyenne, la fission de  $^{235}\text{U}$  crée 2.0034 noyaux. Ce résultat est obtenu en sommant les rendements indépendants de fission<sup>26</sup> de chaque noyau tabulés dans JEFF-3.1.1.

L'énergie totale émise par les photons retardés de fission est tabulée dans le fichier ENDF. Elle est donnée dans le Tableau IV-2 du paragraphe précédent. Cette quantité peut également être calculée à partir des rendements cumulés de fission<sup>27</sup> et des énergies  $\gamma$  totales émises par désintégration<sup>28</sup> de chaque produit de fission radioactif selon la formule :

$$E_{\gamma, \text{tot}} = \sum_{PF} Y_c^f \cdot E_{\gamma}(PF)$$

A travers ce calcul, nous obtenons une énergie totale émise sous forme de  $\gamma$  retardés de fission de  $6.193 \pm 0.150$  MeV pour la fission thermique de  $^{235}\text{U}$ . Les 150 keV d'incertitude ont été obtenus de manière très grossière en ne prenant en compte que les incertitudes sur les énergies  $\gamma$  émises. De plus, celles-ci n'ont pas été sommées quadratiquement mais linéairement. Un calcul rigoureux doit prendre en compte les incertitudes sur les rendements de fission également. Cependant, les très fortes corrélations, qui sont absentes des fichiers d'évaluations, rendent complexes le calcul de l'incertitude totale. Un travail de thèse a été effectué autour de cette problématique afin d'estimer l'incertitude sur les calculs de puissance résiduelle[51].

Les calculs de la puissance résiduelle d'un réacteur après la chute des grappes de sécurité, se limite à estimer l'énergie totale émise sous forme de photon (et d'autres particules). Par conséquent, il est inutile de connaître en détail les spectres et les multiplicités des sources photoniques. Ce n'est pas le cas lorsque l'on effectue des calculs d'échauffement photonique car le transport des particules entre en jeu. Le spectre en énergie des sources photoniques doit être connu pour pouvoir être simulé ensuite. Dans la bibliothèque JEFF-3.1.1, certains des produits de fission radioactifs émetteurs de  $\gamma$  n'ont aucun spectre tabulé associé. Pour la fission thermique de  $^{235}\text{U}$ , cela représente 360 noyaux sur les 977 produits de fission. L'énergie  $\gamma$  totale normalement émise par l'ensemble de ces noyaux est d'environ 960 keV. La plupart de ces produits de fission ont un rendement de fission très faible et ne contribue presque pas à cette énergie. C'est le cas par exemple du  $^{64}\text{Mn}$  dont le rendement de fission est de l'ordre de  $10^{-12}$ . D'autres noyaux contribuent très fortement à cette énergie « sans spectre ». C'est notamment le cas du  $^{139}\text{Xe}$ . Les produits de fission contribuant à plus de 1% aux 960 keV « sans spectre » sont listés dans le Tableau IV-3.

---

<sup>26</sup> MF8-MT454

<sup>27</sup> MF8-MT459

<sup>28</sup> MF8-MT457

**Tableau IV-3 Liste des principaux produits de fission avec des spectres  $\gamma$  de désintégration manquants**

<b>Noyau</b>	$T_{1/2}$	Energie $\gamma$ par fission	Contribution par rapport à l'énergie « sans spectre » (940 keV)	Contribution par rapport à l'énergie retardée totale (6.193 MeV)
	[s]	[keV]	[%]	[%]
$^{139}\text{Xe}$	30	86.276	8.99	1.39
$^{143}\text{Ba}$	15	75.229	7.84	1.21
$^{90}\text{Kr}$	32	71.500	7.45	1.15
$^{102}\text{Nb}$	1.3	67.424	7.02	1.09
$^{136\text{m}}\text{I}$	47	54.199	5.65	0.88
$^{140}\text{Xe}$	14	52.995	5.52	0.86
$^{97}\text{Sr}$	0.4	41.601	4.33	0.67
$^{145}\text{Ba}$	4	40.307	4.20	0.65
$^{103}\text{Nb}$	2	39.624	4.13	0.64
$^{144}\text{Ba}$	12	36.336	3.79	0.59
$^{143}\text{Cs}$	2	33.973	3.54	0.55
$^{141}\text{Xe}$	2	32.195	3.35	0.52
$^{85}\text{Se}$	32	22.348	2.33	0.36
$^{86}\text{Se}$	15	21.361	2.23	0.34
$^{147}\text{Pr}$	804	20.723	2.16	0.33
$^{146\text{m}}\text{La}$	20	20.572	2.14	0.33
$^{134}\text{Sb}$	10	14.783	1.54	0.24
$^{104}\text{Mo}$	60	12.947	1.35	0.21
$^{146}\text{Ba}$	2	12.709	1.32	0.21
$^{51}\text{Sn}$	56	11.996	1.25	0.19
$^{130\text{m}}\text{Sb}$	378	11.082	1.15	0.18
$^{137}\text{Te}$	2	10.860	1.13	0.18
$^{104}\text{Nb}$	5	9.812	1.02	0.16
total		800.855	83.44	12.93

Nous pouvons voir que les principaux produits de fission émetteurs de  $\gamma$  retardés se désintègrent en quelques minutes. Or, un calcul à l'aide du code PEPIN[14] de résolution de l'équation de Bateman permet de montrer qu'entre 0 et  $10^3$ s après la fission seule 60% de l'énergie a été dissipée. Environ 95% de l'énergie est émise au bout de  $10^6$ s. Ainsi, les lacunes de JEFF-3.1.1 sont d'autant plus importantes que l'échelle de temps de l'expérience étudiée est courte. Cette étude systématique n'a pas été effectuée pour les deux autres bibliothèques. Cependant, nous pouvons noter qu'au moins une partie des produits de fission listés y possèdent bien un spectre de production de  $\gamma$ .



Nous pouvons noter que dans la bibliothèque JEFF-2.2, qui est une version antérieure à JEFF-3.1.1., la plupart de ces noyaux contenaient des spectres de production  $\gamma$ . Un grand travail a été effectué pour estimer ce que l'on appelle le Pandémonium[52] afin de mieux connaître la fraction d'énergie émise par les  $\beta$  et les  $\gamma$  après chaque désintégration radioactive. Il semble que lors de la création de la nouvelle bibliothèque prenant en compte ces mesures, certains spectres jugés incohérents pour certains noyaux ont été supprimés. C'est notamment le cas du  $^{139}\text{Xe}$ .

## IV.4 La capture radiative

### IV.4.i Principe de la capture radiative

On appelle capture radiative du neutron ( $n, \gamma$ ) l'absorption d'un neutron par un noyau cible  $^A_Z\text{X}$  suivie uniquement de l'émission de photon  $\gamma$  et/ou d'électrons de conversion.

$$^1_0n + ^A_Z\text{X} \rightarrow ^{A+1}_Z\text{X} + \gamma$$

$$Q = S_n(^{A+1}_Z\text{X})$$

$S_n$  est l'énergie de séparation du dernier neutron. Pour les noyaux considérés dans ce document  $S_n$  est toujours positif et sa valeur varie en général entre 6 et 12 MeV.

La Figure IV-8 décrit la réaction de capture radiative dans le cas du processus du noyau composé. Un neutron est absorbé par le noyau cible  $^A_Z\text{X}$ , ce qui crée le noyau composé  $^{A+1}_Z\text{X}$ . Juste après l'absorption du neutron incident, le noyau composé se trouve dans un état défini par deux paramètres : un moment angulaire total  $J$  et une énergie d'excitation  $E$ . Ces deux paramètres dépendent de l'énergie du neutron incident  $E_n$ , de son spin  $s = \pm 1/2$  et de son moment orbital  $l$ .

$$\vec{J} = \vec{I} + \vec{l} \pm 1/2$$

$$E = E_n + S_n$$

Le noyau se relaxe ensuite vers son état fondamental ou vers un état métastable par transitions  $\gamma$  successives. Comme pour la diffusion inélastique, le noyau composé n'est pas le seul processus possible. Il est cependant majoritaire.

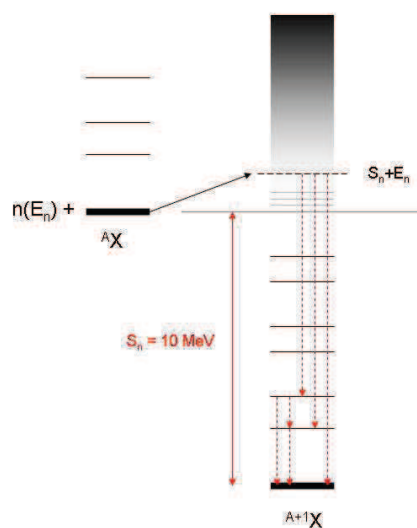


Figure IV-8 La capture radiative dans le modèle du noyau composé

#### IV.4.ii Les chaleurs de réactions dans JEFF-3.1.1

Le  $Q$  de la réaction<sup>29</sup> se déduit de la différence de masse entre le noyau cible  ${}^A_ZX$  et le noyau résiduel  ${}^{A+1}_ZX$  tel qu'exprimé dans le chapitre 3. Les masses des différents noyaux sont très bien connues et tabulées dans la bibliothèque de référence AME03[53]<sup>30</sup> avec des incertitudes inférieures à 0.1% voire même 0.01% dans beaucoup de cas. Dans l'annexe A, nous comparons la valeur de la chaleur de réaction associée à la capture neutronique dans JEFF-3.1.1 avec celles évaluées dans AME03 pour les principaux produits de fission responsables de la perte de réactivité dans les réacteurs nucléaires.

Nous pouvons voir que les différences obtenues vont au-delà de l'incertitude sur les valeurs contenues dans AME03. Les chaleurs de réaction dans JEFF-3.1.1 doivent donc être changées pour correspondre à ces valeurs de références. Ce travail a déjà été effectué par David Bernard et a été pris en compte dans la bibliothèque d'application CEA2005.

#### IV.4.iii Etat des lieux des spectres de capture radiative dans JEFF-3.1.1 et les autres bibliothèques

Dans la bibliothèque JEFF-3.1.1, la plupart des produits de fission listés dans l'annexe A ne possèdent pas de spectres  $\gamma$ . Ce n'est pas le cas des autres bibliothèques. Ainsi, la bibliothèque JENDL-4.0 possède des spectres de capture pour les familles d'isotopes suivantes : Xe, Nd, Cs, Sm, Eu, Pm. La bibliothèque ENDF/B-VII.0 possède quant à elle des spectres pour les isotopes et les familles d'isotopes suivants :  $^{131}\text{Xe}$ , Nd,  $^{133}\text{Cs}$ , Sm,  $^{155}\text{Eu}$ ,  $^{157}\text{Eu}$ , Tc et  $^{151}\text{Pm}$ . D'autres spectres sont disponibles pour d'autres produits de fission non listés dans l'annexe A qui sont donc peu capturant.

Dans l'annexe A, nous avons listé les données de production  $\gamma$  pour certains noyaux d'importance contenus usuellement dans un réacteur nucléaire pour la bibliothèque JEFF-3.1.1. Certains noyaux ne possèdent pas de données de production photoniques. C'est le cas des isotopes de l'argent, de l'indium, du cadmium et du gadolinium. Dans la bibliothèque ENDF/B-VII.0, les productions photoniques associées au Gd et à l'Ag sont présentes. Dans JENDL-4.0, tous les noyaux cités ont des spectres de production  $\gamma$ .

D'autres noyaux dans JEFF-3.1.1 possèdent des spectres de production  $\gamma$  mais ceux-ci sont incohérents d'un point de vue énergétique. C'est notamment le cas des isotopes du fer, de l'aluminium et du titane. Ces incohérences sont mises en évidence sur les Figure IV-9, Figure IV-10 et Figure IV-11. Pour le  $^{56}\text{Fe}$ , l'énergie totale dégagée par les  $\gamma$  est cohérente pour la capture radiative aux faibles énergies neutroniques. Cependant, en comparaison de JENDL-4.0 et ENDF/B-VII.0, la forme du spectre d'émission  $\gamma$  est décalée vers les basses énergies. Certaines mesures récentes donnent raison à ces deux bibliothèques plutôt qu'à JEFF-3.1.1.

---

<sup>29</sup> MF3

<sup>30</sup> Atomic Mass Evaluation 2003

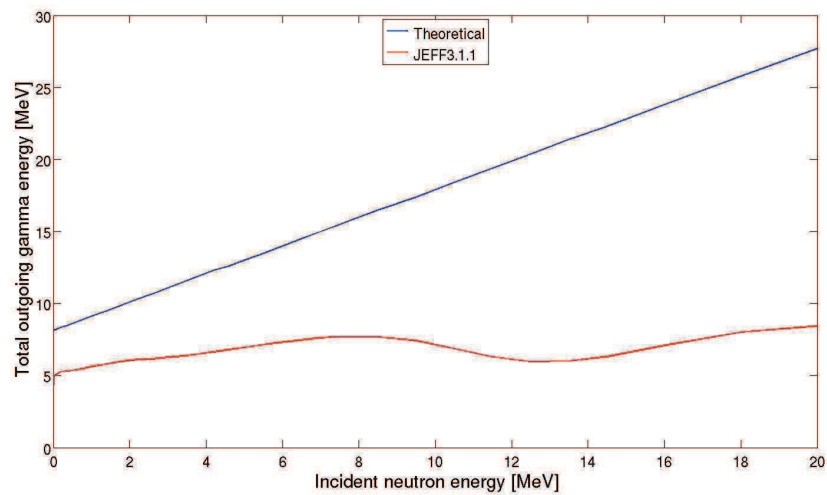


Figure IV-9 Comparaison de l'énergie théorique et de l'énergie  $\gamma$  émise selon JEFF-3.1. pour  $^{48}\text{Ti}(n,\gamma)$

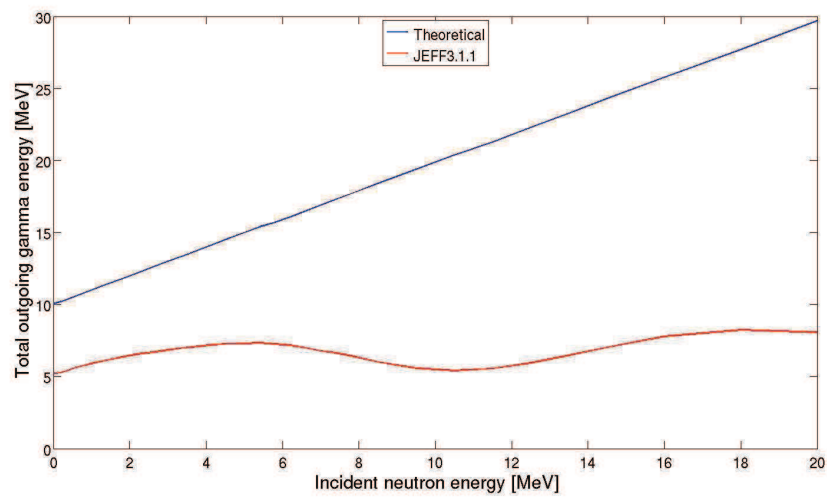


Figure IV-10 Comparaison de l'énergie théorique et de l'énergie  $\gamma$  émise selon JEFF-3.1. pour  $^{57}\text{Fe}(n,\gamma)$

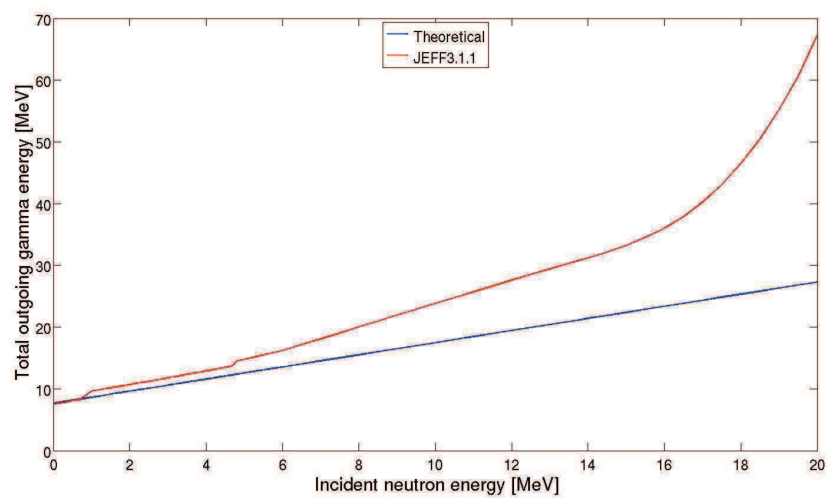


Figure IV-11 Comparaison de l'énergie théorique et de l'énergie  $\gamma$  émise selon JEFF-3.1. pour  $^{56}\text{Fe}(n,\gamma)$

## IV.5 Comparaison des différentes sources de photons dans un réacteur

Dans cette partie, nous comparons les différentes sources photoniques dans un réacteur nucléaire. Cela nous permet ainsi d'isoler les réactions nucléaires les plus importantes.

### IV.5.i Estimation des sources de photons dans un cœur de réacteur nucléaire

A l'aide du code de transport de particules TRIPOLI4, nous avons calculé les taux de réactions neutroniques dans différents composants d'un crayon de combustible UOx enrichi à 4.5%. Ce crayon a un burn-up de 35000 MWj/t typique de ceux que l'on trouve dans un réacteur nucléaire à la fin de trois cycles. Le Tableau IV-4 donne la répartition des taux de réaction dans le combustible. Ceux-ci sont normalisés à 100 absorptions neutroniques (fission ou capture radiative) dans le combustible. Nous négligeons donc les réactions de type (n,p), (n, $\alpha$ ) dans ce bilan. Cela ne pose pas de problème car le but de cette partie est d'établir des ordres de grandeurs et non d'obtenir des valeurs précises. Les énergies  $\gamma$  ont été obtenues en moyennant les chaleurs de réaction de capture entre les principaux produits de fission et actinides.

**Tableau IV-4 Taux de réaction dans un crayon combustible enrichi à 4.5% pour un burn-up de 35 GWj/t**

Réaction	Noyaux	Taux de réaction [%]	Energie $\gamma$ émise par réaction [MeV]	Contribution à l'énergie $\gamma$ totale [%]
(n, $\gamma$ )	Produits de fission	12.6	7.56	15.4
	Actinides	46.5	5.26	39.6
(n,f)	Actinides	40.9	6.79	45.0

Nous pouvons constater que les produits de fission génèrent plus de 10% de l'énergie  $\gamma$  émise dans un réacteur. Il est donc essentiel de posséder les spectres de production  $\gamma$  adéquats afin de ne pas sous-estimer les échauffements photoniques en cours d'irradiation.

### IV.5.ii Comparaison des sources de photons dans le réflecteur en acier d'un réacteur nucléaire

A l'aide de TRIPOLI4.7, nous avons estimé les taux de production photonique dans l'acier. Pour cela, nous avons simulé un réflecteur en acier autour d'un assemblage combustible. Cette géométrie est la même que celle utilisée dans le chapitre 3 pour estimer les échauffements photoniques et neutroniques. Les crayons combustibles simulés sont tous de burn-up nul.

Les taux de réaction obtenus dans le réflecteur en acier et le combustible sont donnés dans les Tableau IV-5 et Tableau IV-6. Ces taux de réactions ont été obtenus sur l'ensemble des crayons combustibles et sur l'ensemble de l'acier du réflecteur. Les incertitudes ne sont pas indiquées car elles sont très faibles et par conséquent non pertinentes pour un calcul d'ordre de grandeur.

**Tableau IV-5 Comparaison des taux de réaction dans l'acier**

Réaction	Taux de réaction [%]
Inélastique discrète	54.9
Inélastique continue	2.0
Capture radiative	43.1
Total acier	100

**Tableau IV-6 Comparaison des taux de réactions dans le combustible**

Réaction	Taux de réaction [%]
Inélastique discrète	17.6
Inélastique continue	7.6
Capture radiative	29.2
Fission	45.6
Total combustible	100

Nous avons converti ces taux de réaction en termes d'échauffements photoniques. Pour cela, nous avons grossièrement estimé les énergies photoniques émises suite à chacune des réactions :

- Pour la diffusion inélastique discrète, l'énergie moyenne émise est de 50 keV dans la zone fissile et de 600 keV dans l'acier.
- Pour la diffusion inélastique continue, l'énergie moyenne émise est de 1 MeV dans le combustible et de 3 MeV dans l'acier.
- Pour la capture, l'énergie moyenne émise est de 5 MeV dans le combustible et de 8 MeV dans l'acier.
- Pour la fission, nous adoptons une valeur de 13.3 MeV prenant en compte les  $\gamma$  prompts et retardés tels que tabulés dans le Tableau IV-2.

Les résultats sont donnés dans le Tableau IV-7.

**Tableau IV-7 Ordre de grandeur de l'énergie photon émise dans le combustible et dans le réflecteur**

Volume	Réaction	Energie photon [%]
Réflecteur	Inélastique discrète	8.6
	Inélastique continue	1.7
	Capture radiative	89.7
	total	100
Cœur	Inélastique discrète	0.1
	Inélastique continue	1.0
	Capture radiative	19.2
	Fission	79.7
	Total	100

Dans le réflecteur, près de 90% de l'énergie émise sous forme de photon  $\gamma$  est due aux captures radiatives. Dans le combustible, près de 80% de l'énergie émise est due à la fission et les 20% restant à la capture radiative. Ainsi, la diffusion inélastique, qu'elle soit discrète ou continue, contribue très peu à l'énergie totale emportée par les photons.

Nous avons décomposé les taux de réactions dans le réflecteur en fonction des noyaux cibles. Les résultats sont résumés dans le Tableau IV-8.

Tableau IV-8 Taux de réactions neutroniques sur les noyaux composants le réflecteur en acier

Noyau	Fraction massique [%]	Capture radiative [%]	Diffusion inélastique [%]		
			totale	discrète	continue
<sup>54</sup> Fe	70.688	3.23	2.27	2.28	2.07
<sup>56</sup> Fe		51.59	60.10	60.71	43.66
<sup>57</sup> Fe		1.34	14.85	15.18	5.78
<sup>58</sup> Fe		0.13	0.27	0.27	0.22
<sup>50</sup> Cr	17.910	4.00	0.98	0.99	0.81
<sup>52</sup> Cr		4.78	8.18	7.73	20.09
<sup>53</sup> Cr		9.77	2.36	2.26	5.07
<sup>54</sup> Cr		0.07	0.53	0.51	1.20
<sup>58</sup> Ni	8.210	8.51	2.30	2.19	5.25
<sup>60</sup> Ni		0.19	1.27	1.17	3.88
<sup>61</sup> Ni		0.09	0.44	0.43	0.85
<sup>62</sup> Ni		1.15	0.20	0.17	1.05
<sup>64</sup> Ni		0.04	0.04	0.03	0.37
<sup>92</sup> Mo	0.320	0.02	0.02	0.02	0.07
<sup>94</sup> Mo		0.02	0.03	0.02	0.08
<sup>95</sup> Mo		1.38	0.12	0.08	1.03
<sup>96</sup> Mo		0.19	0.06	0.05	0.19
<sup>97</sup> Mo		0.16	0.06	0.05	0.55
<sup>98</sup> Mo		0.16	0.09	0.08	0.33
<sup>100</sup> Mo		0.03	0.06	0.04	0.33
S	0.007	0.00	0.00	0.00	0.00
Si	0.39	0.05	0.16	0.17	0.01
Sn	0.01	0.02	0.01	0.01	0.03
Ti	0.01	0.02	0.01	0.01	0.02
Al	0.062	0.01	0.05	0.06	0.00
C	0.019	0.00	0.00	0.00	0.00
Co	0.070	2.26	0.06	0.06	0.25
P	0.014	0.00	0.01	0.01	0.01
Nb	0.010	0.14	0.05	0.05	0.19
Mn	1.870	10.00	5.15	5.13	5.62
<sup>63</sup> Cu	0.290	0.53	0.20	0.19	0.53
<sup>65</sup> Cu		0.11	0.07	0.07	0.33
total	100	100	100	100	100

Les noyaux les plus capturants sont par ordre décroissant d'importance : <sup>56</sup>Fe, <sup>55</sup>Mn, <sup>53</sup>Cr, <sup>58</sup>Ni, <sup>52</sup>Cr, <sup>50</sup>Cr, <sup>54</sup>Fe, <sup>59</sup>Co, <sup>57</sup>Fe et <sup>62</sup>Ni. Ils représentent à eux-seuls 98.03 % de la capture radiative dans le réflecteur. Nous avons remarqué dans la partie précédente que les spectres associés à la capture sur le fer étaient incohérents. Cela conforte l'idée qu'il est



indispensable de proposer de nouvelles évaluations pour la prochaine version de la bibliothèque JEFF.

Pour la diffusion inélastique, les noyaux d'importance sont par ordre décroissant :  $^{56}\text{Fe}$ ,  $^{57}\text{Fe}$ ,  $^{52}\text{Cr}$ ,  $^{55}\text{Mn}$ ,  $^{53}\text{Cr}$ ,  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{54}\text{Fe}$  et  $^{60}\text{Ni}$ . Ils représentent à eux seuls 96.46 % de la diffusion inélastique dans le réflecteur. Dans les évaluations JEFF-3.1.1, tous ces noyaux possèdent des spectres de production  $\gamma$ .

#### **IV.6 Conclusion sur les productions photoniques dans les bibliothèques de données nucléaires**

Nous avons effectué une étude critique des données de production photonique contenues dans les bibliothèques de données nucléaires avec une attention particulière pour JEFF-3.1.1. Bien que celle-ci ait depuis longtemps démontrée son efficacité pour les calculs de transport neutronique, la production  $\gamma$  doit être améliorée. La bibliothèque JENDL-4.0 semble quant à elle posséder le plus de données relatives à ces productions.

Des solutions ont été proposées et finalisées afin de combler les lacunes de JEFF-3.1.1 :

- De nouvelles évaluations des isotopes du plutonium sont en cours de production pour la prochaine bibliothèque JEFF-3.2. Celles-ci contiendront les spectres  $\gamma$  de fission.
- La bibliothèque JEFF-3.1.2 qui a été produite entre 2011 et 2012 contient dorénavant les spectres de capture radiative des produits de fission. Ceux-ci ont été tirés de la bibliothèque TENDL-2011 et proposés par le National Nuclear Laboratory situé au Royaume-Uni dans le cadre du OECD/WPEC-27[54].
- De nouveaux spectres de capture radiative ont été proposés pour 16 noyaux essentiels dans un réacteur nucléaire :  $^{54}\text{Fe}$ ,  $^{56}\text{Fe}$ ,  $^{57}\text{Fe}$ ,  $^{58}\text{Fe}$ ,  $^{107}\text{Ag}$ ,  $^{109}\text{Ag}$ ,  $^{113}\text{Cd}$ ,  $^{113}\text{In}$ ,  $^{115}\text{In}$ ,  $^{174}\text{Hf}$ ,  $^{177}\text{Hf}$ ,  $^{178}\text{Hf}$ ,  $^{179}\text{Hf}$ ,  $^{180}\text{Hf}$ ,  $^{155}\text{Gd}$ ,  $^{157}\text{Gd}$ . Le processus de production de ces nouvelles évaluations sera explicité dans le prochain chapitre.
- Un travail a été débuté sur la production de nouvelles évaluations de spectres de désintégration radioactive mais n'a pour l'instant pas été finalisé.

## Chapitre V Production de nouveaux spectres gamma de capture radiative du neutron pour JEFF3

Pour obtenir la meilleure précision sur les calculs d'échauffement photonique, la qualité des données nucléaires de base est l'un des paramètres essentiels. Ces données regroupent entre autres les sections efficaces neutroniques qui permettront de calculer les taux de réactions, les spectres énergétiques des sources photoniques produites lors des réactions nucléaires et enfin les sections efficaces photo-atomiques. Nous avons vu dans le chapitre précédent qu'à l'heure actuelle, les sources photoniques dans la bibliothèque JEFF3.1.1 doivent être réévaluées. Un certain nombre d'erreurs et omissions ont été mises en évidence, principalement sur les spectres gamma de capture radiative du neutron. Il est donc indispensable de proposer de nouvelles évaluations pour les prochaines versions de cette bibliothèque.

Dans ce chapitre, nous proposons ainsi une méthode de production de nouveaux spectres  $\gamma$  de capture radiative du neutron. Nous proposerons ensuite de nouvelles évaluations pour 16 isotopes essentiels au bon fonctionnement d'un réacteur nucléaire.

Ces nouvelles évaluations doivent dans l'idéal se baser sur des mesures. Celles-ci, bien qu'existantes, sont très souvent incomplètes et ne permettent pas de décrire la totalité des spectres. Dans ce cas, les informations manquantes sont calculées en se basant sur des modèles nucléaires.

### V.1 Les mesures de spectres gamma de capture radiative

Il existe au moins deux bibliothèques contenant des données expérimentales liées aux spectres photoniques de capture radiative :

- La bibliothèque ENSDF<sup>31</sup>[55],
- La bibliothèque EGAF<sup>32</sup>[56].

#### V.1.i ENSDF : une bibliothèque de schéma de niveaux

Pendant une capture radiative du neutron, les photons  $\gamma$  sont émis lors de la désexcitation du noyau résiduel. Celui-ci perd son surplus d'énergie interne en passant d'un niveau d'excitation à un autre moins énergétique jusqu'à atteindre un état stable ou métastable. Le passage d'un niveau d'énergie  $E_{\text{sup}}$  à un autre d'énergie  $E_{\text{inf}}$  s'effectue par transition  $\gamma$  conduisant le plus souvent à l'émission d'un photon  $\gamma$  d'énergie  $E_{\text{sup}} - E_{\text{inf}}$ . Pour un niveau intermédiaire donné, il existe plusieurs transitions  $\gamma$  possibles vers différents niveaux d'énergie inférieure. On associe une probabilité de décroissance à chacune de ces transitions. Ainsi, en principe, si les énergies de tous les niveaux discrets ainsi que toutes les probabilités de transition  $\gamma$  sont connues entre l'état fondamental et des énergies d'excitation de l'ordre de  $S_n + E_n^{33}$ , il est possible de reconstruire le spectre d'émission photon de capture radiative sans aucune donnée complémentaire. Ce spectre sera alors composé de raies  $\gamma$  discrètes.

---

<sup>31</sup> Evaluated Nuclear Structure Data Files

<sup>32</sup> Evaluated Gamma-ray Activation Files

<sup>33</sup> Soit l'énergie d'excitation du noyau résiduel juste après la capture d'un neutron d'énergie  $E_n$

La bibliothèque ENSDF contient les schémas de niveau de nombreux noyaux. Ceux-ci sont reconstruits à partir d'un grand nombre de mesures. A titre d'exemple, le schéma de niveaux du  $^{57}\text{Fe}$  contient des informations tirées entre autres de :

- Une expérience d'irradiation du  $^{55}\text{Mn}$  par des tritons pour étudier la réaction  $^{56}\text{Mn}(t, n\gamma)^{57}\text{Fe}$ . L'étude des énergies des neutrons émis a permis d'identifier les énergies de 11 niveaux d'excitation.
- La mesure de la décroissance du  $^{57}\text{Mn}$  qui fait apparaître l'énergie du 1<sup>er</sup> niveau d'excitation du  $^{57}\text{Fe}$ .
- La mesure du spectre photonique émis suite à la capture radiative sur le  $^{56}\text{Fe}$ .

Le traitement individuel de chacune de ces expériences est disponible dans la bibliothèque ENSDF ainsi que dans la revue Nuclear Data Sheet. D'autres mesures non évaluées sont également disponibles dans une bibliothèque connexe nommée XUNDL.

Les schémas de niveaux disponibles dans ENSDF ne sont complets que jusqu'à une certaine énergie. C'est-à-dire qu'entre le niveau fondamental et un niveau d'énergie  $E_m$  tous les niveaux et toutes les intensités des transitions gamma sont connus. En général,  $E_m$  est inférieure à l'énergie de séparation du dernier neutron  $S_n$  qui est l'énergie d'excitation minimale du noyau juste après une capture radiative<sup>34</sup>. Au-delà de l'énergie  $E_m$ , physiquement, les énergies des niveaux d'excitation sont si proches que les mesures ont du mal à les différencier et à les identifier individuellement. Dans le cas de mesures de rayonnements  $\gamma$ , le spectre d'émission  $\gamma$  contiendra une composante discrète correspondant aux  $\gamma$  émis par les niveaux discrets « mesurables », et une composante continue liée aux niveaux discrets « non mesurables ».

On peut notamment observer ce phénomène lors de la mesure du spectre d'émission  $\gamma$  suite à la capture radiative du Gd. Ce spectre, tiré de mesures effectuées en Russie dans les années 50 et publiées en 1957 [57], est représenté sur la Figure V-1. On observe particulièrement le front continu dont le maximum se situe autour de 3 MeV.

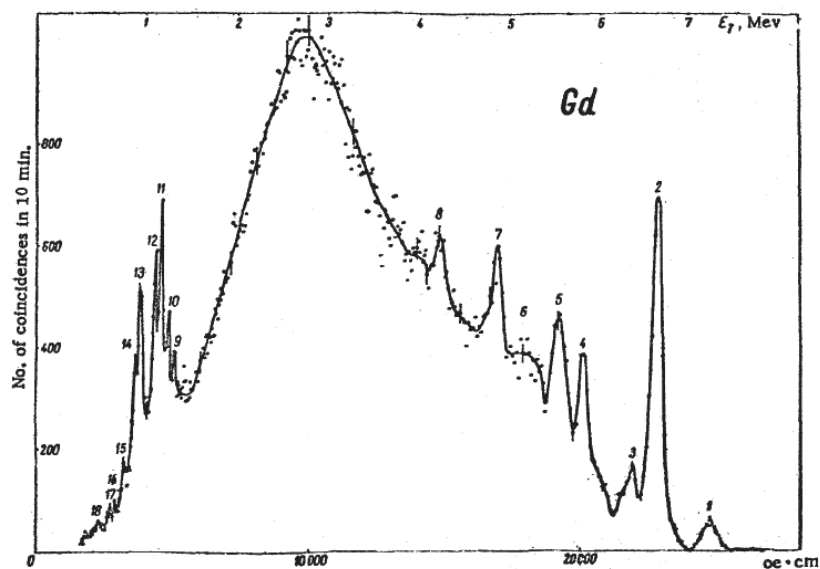


Fig. 1. Experimental  $\gamma$ -ray spectrum of  $\text{Gd}_2\text{O}_3$ .

Figure V-1 Spectre d'émission photonique mesuré suite à la capture radiative d'un neutron par une matrice de gadolinium

<sup>34</sup> Seuls les noyaux légers ( $A < 10$ ) ont parfois un schéma de niveau discret décrite jusqu'à des énergies supérieures à  $S_n$

Bien que dans la bibliothèque ENSDF les schémas de niveaux soient incomplets, celle-ci permet tout de même de compléter les mesures de spectres gamma de capture radiative. En identifiant certaines des transitions gamma observées expérimentalement, il est possible de déduire toute la cascade gamma qui suit. Ce travail est actuellement effectué au NNDC et les résultats sont compilés dans la bibliothèque CapGam qui est associée à ENSDF.

Cette bibliothèque ne contient donc que la partie discrète des spectres d'émissions photon puisqu'elle ne se base que sur les schémas de niveaux. De plus, seule la capture d'un neutron thermique est traitée. Cette bibliothèque est donc incomplète pour prédire le spectre gamma de capture radiative sur l'ensemble du spectre neutronique.

#### **V.1.ii EGAF : une bibliothèque de mesure des photons gamma de capture radiative**

Entre 1999 et 2003, un programme de mesure des spectres de production photonique par capture neutronique radiative a été lancé par l'AIEA<sup>35</sup>. Cette demande avait pour but d'améliorer la méthode non-destructive de mesure des éléments par analyse de spectre  $\gamma$  nommée PGAA<sup>36</sup>. Cette méthode de caractérisation passive non-intrusive consiste à identifier un élément à travers le spectre  $\gamma$  émis suite à une capture radiative du neutron. Elle nécessite par conséquent la connaissance la plus précise possible de ces mêmes spectres.

Dans le cadre de ce programme, des mesures de spectres  $\gamma$  de capture radiative ont été réalisées sur 255 noyaux dans différents réacteurs nucléaires expérimentaux. Les flux neutroniques utilisés étaient thermiques et seuls les photons discrets ont été analysés. La majorité de ces mesures étaient effectuées avec le réacteur de l'Institute of Isotope and Surface Chemistry situé à Budapest. Le faisceau de neutron utilisé était à 60K. Trois autres réacteurs ont également été utilisés pour effectuer les mesures. Ils étaient situés en Inde, en Corée du Sud et au Vietnam.

La bibliothèque EGAF référence les spectres photoniques de capture radiative obtenus à partir de chacune de ces mesures. Ces spectres ont été évalués puis comparés et complétés avec l'aide de la bibliothèque ENSDF. Des schémas de niveaux très incomplets en comparaison de ceux présents dans ENSDF ont également été déduits de ces mesures. Cette bibliothèque a l'avantage par rapport à CapGam de prendre en compte des expériences récentes dont l'instrumentation était optimisée pour acquérir un maximum de raies  $\gamma$  discrètes sur une gamme d'énergie allant de quelques keV à un peu plus de 10 MeV.

Comme pour CapGam, les spectres disponibles sont rarement complets puisque la partie continue n'est pas mesurée. Nous avons représenté sur la Figure V-2 la fraction de l'énergie totale émise suite à une capture radiative qui est effectivement dissipée dans les spectres de la bibliothèque EGAF. Nous pouvons voir que ce ratio est égal à 1 pour les noyaux dont la masse est inférieure à 60. C'est-à-dire que le spectre discret disponible dans EGAF semble contenir toute l'énergie disponible créée lors de la réaction de capture radiative. Au-delà de cette masse, ce ratio diminue. Dans ce cas le continuum gamma est au mieux non-négligeable et au pire prépondérant.

---

<sup>35</sup> Agence Internationale de l'Energie Atomique

<sup>36</sup> Prompt Gamma-Ray Activation Analysis

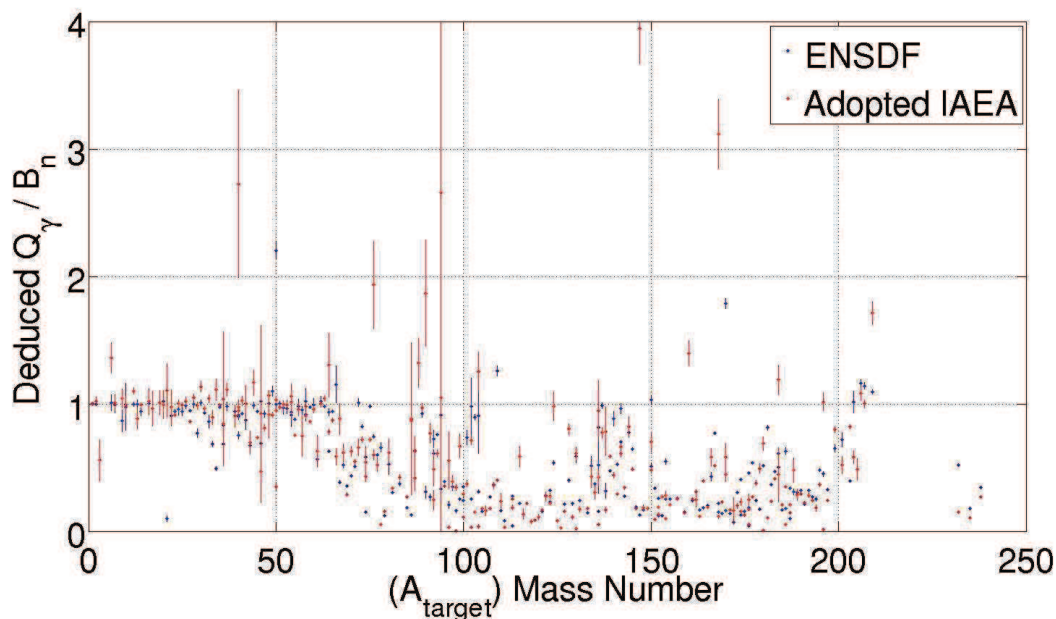
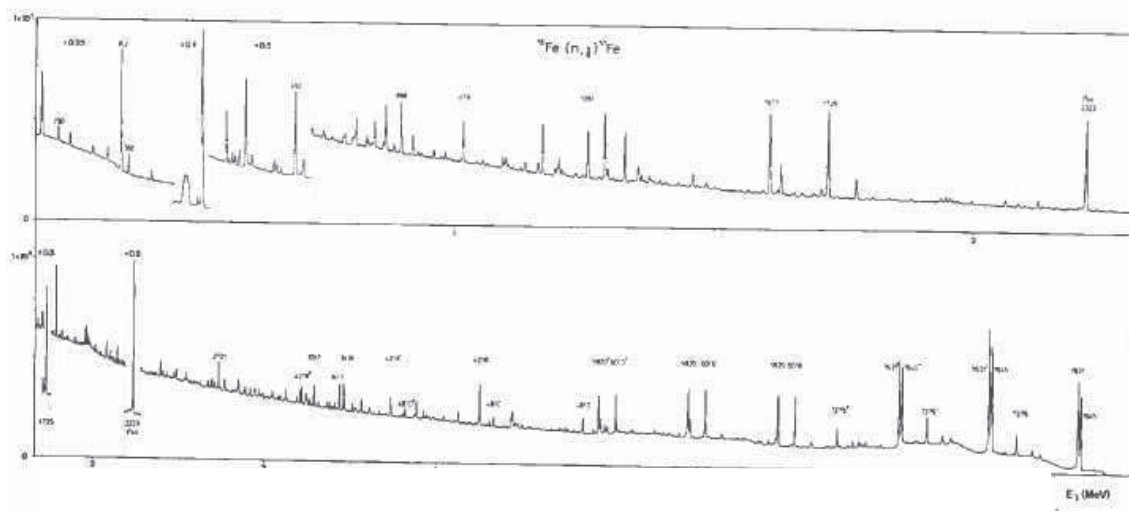


Figure V-2 Rapport de l'énergie disponible dans les spectres de EGAF  $Q_\gamma$  sur l'énergie totale disponible par capture radiative  $B_n=S_n$

Le  $^{56}\text{Fe}$  est un noyau dont la masse est inférieure à 60. Des mesures effectuées à la fin des années 70[58] montrent une absence de continuum tel que celui observé dans le cas des mesures du gadolinium. Ce spectre du  $^{56}\text{Fe}$  est représenté sur la Figure V-3.



- Ensuite, au moment du choc, les fonctions d'ondes du neutron et du noyau s'interpénètrent et ne sont plus dissociables. Ce nouveau système est instable et a une durée de vie très courte. Ses caractéristiques varient selon le type de réaction et l'énergie de la particule incidente.
- Un nouveau système est ensuite créé. Il est composé d'un noyau résiduel et d'une particule. Les deux ont une énergie cinétique non-nulle dans le référentiel du laboratoire. La nouvelle particule dite primaire peut aussi bien être une particule massique telle qu'un neutron ou un proton, qu'un photon  $\gamma$  ou un électron.
- Si après émission de la particule primaire, le noyau résiduel est toujours dans un état instable, il évacuera son surplus d'énergie en émettant des particules secondaires (neutron, proton, photon, ...) jusqu'à atteindre un état stable ou métastable. C'est l'état final du système.

Il existe une multitude d'états possibles pour chaque étape intermédiaire. Chacun de ces états est accessible avec une certaine probabilité qui elle-même dépend de l'état de l'étape intermédiaire. Ainsi, il existe un très grand nombre de chemins réactionnels possibles allant de la première étape à la dernière. On peut appliquer une probabilité d'occurrence à chacun de ces chemins. Celles-ci permettront ensuite de déduire les sections efficaces d'interaction particule matière. Par exemple, dans le cas de la capture radiative du neutron, la section efficace est la somme des probabilités d'occurrence des chemins réactionnels pour lesquels l'éjectile primaire émis lors de la troisième étape et tous les éjectiles secondaires émis lors de la quatrième étape sont des photons ou des électrons de conversion. En général, la condition sur l'éjectile primaire est suffisante. En effet, il est très rare que l'éjectile primaire soit un photon et que parmi les éjectiles secondaires une autre particule soit émise. Dans le cas du  $^{239}\text{Pu}$ , ou ce phénomène est particulièrement observé lors de la fission, la réaction  $(n,\gamma f)$  ne représente qu'une fission sur 1000. Nous pouvons donc considérer que lorsque l'éjectile primaire est un photon alors l'ensemble des particules secondaires seront toutes des photons (ou des électrons dans le cas d'une conversion interne).

Calculer le spectre de capture radiative revient donc à calculer les spectres individuels d'émission  $\gamma$  associés à chacune des voies correspondant à l'émission d'un  $\gamma$  primaire. Le spectre de capture radiative est constitué de la somme de tous les spectres partiels pondérés par la probabilité d'occurrence de la voie à laquelle ils correspondent.

Ce calcul s'effectue en deux étapes:

- La première étape consiste à calculer la probabilité d'occurrence de chaque voie menant à l'émission d'un photon primaire. Pour cela, nous utilisons le modèle du noyau composé.
- La seconde étape consiste à désexciter le noyau résiduel obtenu après l'émission du photon  $\gamma$  primaire en simulant les transitions  $\gamma$  successive. Pour cela, nous utilisons le modèle de décroissance de Hauser-Feshbach[59].

## V.2.i Le modèle du noyau composé

Il existe trois modèles usuels permettant de prédire les probabilités d'occurrence des réactions nucléaires :

- Le modèle du noyau composé que nous avons évoqué plusieurs fois dans le chapitre précédent,
- Le modèle du pré-équilibre,
- Le processus direct.



Ces trois modèles sont très bien expliqués dans la documentation du code TALYS [60]. Ils se distinguent principalement par la durée de vie de la seconde étape d'une réaction nucléaire telle que décrite précédemment. Ce temps est caractéristique du nombre de collisions intranucléaires effectuées par la particule incidente avec les nucléons du noyau cible. Ainsi, dans le modèle direct, qui est le processus le plus court, l'énergie cinétique transmise par la particule incidente au noyau cible est transférée pendant quelques collisions (1 à quelques unités) avec les nucléons. Dans le cas du noyau composé, qui est le processus le plus long, l'énergie est distribuée entre tous les nucléons du noyau cible. Un noyau dit composé est créé. Le pré-équilibre est un processus médian entre les deux autres processus. La particule incidente interagit avec trop de nucléons pour que le processus soit direct, mais pas assez pour qu'un noyau composé soit formé.

Dans le cas de la capture radiative du neutron, des énergies thermiques jusqu'à environ 1 MeV, seul le processus du noyau composé est actif. Au-delà, le pré-équilibre intervient peu à peu puis prend de l'importance jusqu'à devenir prédominant pour les énergies neutroniques situées autour de 10 MeV. Cependant, à ces énergies, la section de capture radiative est négligeable par rapport à celles des autres réactions nucléaires neutroniques. De plus, dans un réacteur nucléaire, à cette énergie, le flux neutronique est extrêmement faible en comparaison du niveau de flux total (moins de 0.05%<sup>37</sup>). Ainsi, il est possible de considérer que le seul modèle important pour la réaction de capture radiative du neutron est le noyau composé.

Ce modèle postule que lors de la seconde étape où projectile et noyau cible sont indiscernables, un noyau composé bien défini est créé. Ce noyau a une durée de vie trop courte pour que l'on puisse l'observer directement mais suffisamment longue pour qu'il ait « oublié » sa voie de formation, c'est-à-dire quelle était la particule incidente et le noyau cible lors de la première étape. C'est ce que l'on appelle l'hypothèse de Bohr. Ainsi, quel que soit la voie de création du noyau composé, la probabilité que celui-ci se désintègre par émission de particule vers un état particulier est toujours la même. Cette propriété est très utilisée pour les expériences dites « surrogate » ou de transfert qui consistent à étudier certaines réactions nucléaires très difficiles à observer car très peu probables par le biais d'une autre réaction produisant le même noyau composé. Pour plus de précision sur ces expériences, le lecteur pourra se référer à la thèse de Guillaume Boutoux[61].

Le modèle du noyau composé, dans le cas général, permet de calculer la probabilité pour un système d'entrée  $\alpha$  de conduire à un système de sortie  $\alpha'$ . Ces deux systèmes sont constitués d'un projectile et d'un éjectile de type  $a$  et  $a'$  de spin  $s$  et  $s'$ , d'énergie cinétique  $E_a$  et  $E_{a'}$ , de moment orbital et de parité  $l\pi_0$  et  $l'\pi_f$  ainsi que d'un noyau cible et d'un noyau résiduel de spin-parité  $II_0$  et  $II_f$  d'énergie d'excitation  $E_x^0$  et  $E_x^f$ . La nature du noyau composé est fixée par le noyau cible et la particule incidente mais également par le noyau résiduel et l'éjectile :

$$J = s + I + l = s' + I' + l'$$

$$\Pi = \pi_0 \Pi_0 (-1)^l = \pi_f \Pi_f (-1)^{l'}$$

L'expression de la section efficace associée à la réaction nucléaire menant de l'état  $\alpha$  à l'état  $\alpha'$  peut s'écrire ainsi dans le modèle du noyau composé :

---

<sup>37</sup> Résultats obtenus avec un calcul Monte Carlo dans un crayon combustible en milieu infini



$$\sigma_{\alpha\alpha'}^{comp} = D_{comp} \frac{\pi}{k^2} \sum_{J=\text{mod}(I+s,1)}^{I_{\max}+I+s} \sum_{\pi=-1}^1 \frac{2J+1}{(2I+1)(2s+1)} \sum_{j=|J-I|}^{J+I} \sum_{l=|J-s|}^{J+s} \sum_{j'=|J-I|}^{J+I'} \sum_{l'=|j'-s'|}^{j'+s'} \delta_{\pi}(\alpha) \delta_{\pi}(\alpha') \frac{T_{\alpha l j}^J(E_a) \langle T_{\alpha' l' j'}^J(E_{a'}) \rangle}{\sum_{\alpha'', l'', j''} \delta_{\pi}(\alpha'') \langle T_{\alpha'' l'' j''}^J(E_{a''}) \rangle} W_{\alpha l j \alpha' l' j}^J$$

Sans expliciter tous les termes de cette formule, nous pouvons extraire un certain nombre d'informations :

- Les deux premières sommes correspondent aux états de spin parité  $J\pi$  accessibles pour le noyau composé.
- Les deux secondes sommes correspondent aux états possibles du projectile  $j$  autorisant l'apparition d'un noyau composé de moment angulaire total  $J$  sachant que le noyau cible a un spin  $I$ .
- Les deux dernières sommes sont les états possibles de l'éjectile  $j'l'$  autorisés à partir d'un noyau composé de moment angulaire total  $J$  sachant que le noyau résiduel a un spin  $I'$ .
- Le terme  $T_{\alpha l j}^J(E_a)$  représente la probabilité d'atteindre l'état du noyau composé de moment angulaire total  $J$  à partir du système  $\alpha$  dont le projectile de type  $a$ , d'énergie cinétique  $E_a$ , a un moment angulaire total  $j$  et un moment angulaire orbital  $l$ .
- Le terme  $\langle T_{\alpha' l' j'}^J(E_{a'}) \rangle$  représente la probabilité de quitter l'état du noyau composé de moment angulaire total  $J$  en émettant un éjectile de type  $a'$ , d'énergie cinétique  $E_{a'}$ , de moment angulaire total  $j'$  et de moment orbital  $l'$ .

Dans le cas de la capture radiative, le projectile est un neutron et l'éjectile est un photon gamma. La section de capture radiative totale du neutron se déduit de l'intégrale suivante:

$$\sigma_{n,\gamma}^{comp}(E_n) = \int_0^{E_{\gamma}^{\max}} \sigma_{\alpha\alpha'}^{comp}(E_n, E_{\gamma}) dE_{\gamma}$$

$$\alpha = \{n, 1/2, E_n, E_x^0, I, \Pi_0\}$$

$$\alpha' = \{\gamma, 1, E_{\gamma}, E_x^f, I', \Pi_f\}$$

$$E_{\gamma}^{\max} = E_n + S_n$$

Le spectre d'émission des photons gamma primaires se déduit à partir des voies individuelles composant la réaction de capture radiative :

$$S_{n,\gamma}(E_n, E_{\gamma}) = \frac{\sigma_{n,\gamma}(E_n, E_{\gamma})}{\sigma_{n,\gamma}(E_n)} E_{\gamma}$$

Juste après l'émission du gamma primaire, la proportion de noyaux résiduels se trouvant dans l'état d'excitation d'énergie  $E_x^f$ , c'est-à-dire la population du niveau d'énergie  $E_x^f$ , peut s'écrire :

$$P(E_n, E_x^f = E_n + S_n - E_\gamma) = \frac{\sigma_{n,\gamma}(E_n, E_\gamma)}{\sigma_{n,\gamma}(E_n)}$$

D'après cette formule, la somme des populations de chaque niveau est égale à 1.

## V.2.ii Le modèle de décroissance de Hauser-Feshbach

Lors d'une capture radiative du neutron, le modèle du noyau composé permet de connaître la population de tous les niveaux excités du noyau résiduel juste après émission du  $\gamma$  primaire. Il convient à présent de simuler la cascade de transition  $\gamma$  qui suivra. Pour cela, on utilise un second modèle venant compléter celui du noyau composé : le modèle de décroissance de Hauser-Feshbach.

Ce modèle consiste à faire varier la population des niveaux d'excitations du noyau par itération successive jusqu'à ce que celle-ci ne soit plus distribuée que sur le niveau fondamental ou sur un niveau métastable. A chaque itération, la population de chaque niveau excité est distribuée entre les niveaux d'énergie inférieure par transition  $\gamma$  en suivant une loi de probabilité particulière. Pour reproduire le spectre gamma associé, il suffit donc de conserver à chaque itération la population ayant empruntée chaque transition  $\gamma$  et de la pondérer par l'énergie de cette transition.

A chaque nouvelle itération, la population d'un niveau donné dépend donc de la population des niveaux d'énergie supérieure ainsi que de leurs probabilités de décroissance vers ce même niveau. La population du niveau  $n^\circ i'$  s'écrit en fonction de la population des niveaux supérieurs :

$$P^{HF}(E_x(i'), I', \Pi') = \sum_{I, \Pi} \sum_i \left[ P^{HF}(E_x(i), I, \Pi) \right] \times \frac{\Gamma_\gamma(E_x(i), I, \Pi \rightarrow E_{x'}(i'), I', \Pi')}{\Gamma_{tot}(E_x(i), I, \Pi)}$$

On identifie dans cette formule la population des niveaux d'énergie supérieure ainsi que la probabilité de transition de ces niveaux vers le niveau  $i'$ . Cette probabilité est le rapport entre deux quantités nommées largeur de voie. Au numérateur, nous avons la largeur de voie associée à une décroissance du niveau  $i$  vers le niveau  $i'$ .

A basse énergie<sup>38</sup>, les niveaux excités des noyaux usuels sont bien connus. Nous connaissons leurs énergies discrètes et les transitions gamma qui leur sont associés (énergies, intensités et niveau d'arrivée). Les probabilités de transition gamma correspondent tout simplement à l'intensité des transitions gamma tabulées.

Aux plus hautes énergies, l'augmentation de la densité de niveaux par unité d'énergie rend impossible la distinction individuelle des niveaux excités du noyau. Nous devons alors traiter le schéma de niveau de manière statistique en considérant des groupes d'énergie contenant un grand nombre de niveau. Les largeurs de voies doivent également être traitées de manière statistique. L'expression de la largeur de voie individuelle peut s'écrire :

<sup>38</sup> La limite entre haute et basse énergie varie fortement d'un noyau à l'autre

$$\Gamma_{\gamma}(E_x(i), I, \Pi \rightarrow E_x(i'), I', \Pi') = \frac{1}{2\pi\rho(E_x(i), I, \Pi)} \sum_{j'=|J-I'|}^{J+I'} \sum_{l'=|j'-s'|}^{j'+s'} \delta_{\pi}(\alpha') \langle T_{\alpha'l'j'}^J(E_{a'}) \rangle$$

Ici,  $E_x(i)$  ne représente plus l'énergie d'un niveau discret mais l'énergie moyenne d'un groupe énergétique.

Deux quantités apparaissent dans cette formulation:

- La densité de niveaux de spin-parité  $I\Pi$  et d'énergie d'excitation  $E_x(i)$  :  $\rho(E_x(i), I, \Pi)$ ,
- Le coefficient de transmission gamma  $\langle T_{\alpha'l'j'}^J(E_{a'}) \rangle$

Ce second terme dépend d'une valeur nommée fonction de force gamma notée  $f_{\gamma}(E_{\gamma})$  qui dépend elle-même de l'énergie  $E_{\gamma}$  et de la multipolarité  $XL$  du gamma émis :

$$T_{XL}(E_{\gamma}) = 2\pi f_{XL}(E_{\gamma}) E_{\gamma}^{2l+1}$$

La fonction de force et la densité de niveau sont obtenues en utilisant des modèles nucléaires.

### V.2.iii Modèles de fonction de force et de densité de niveaux

Il existe de nombreux modèles permettant de décrire les fonctions de force et les densités de niveaux. Une liste non exhaustive de ces modèles est très bien décrite dans l'article associé à la bibliothèque de paramètres nucléaires RIPL3.0[62]. En se basant sur l'article rédigé par Kopecky et Uhl en 1990[63], nous avons choisi de prendre pour modèle de fonction de force la EGLO (Enhanced Generalized Lorentzian) et comme modèle de densité de niveaux le CGCM (Composite Gilbert-Cameron Model).

#### V.2.iii.a Le modèle composite de Gilbert et Cameron

En théorie, le schéma de niveaux d'un noyau conserve une structure discrète au moins jusqu'à l'énergie de séparation du dernier neutron  $S_n$ . Jusqu'à cette énergie, tous les niveaux sont liés et correspondent aux valeurs propres du puits de potentiel constitué par le noyau. En réalité, les schémas de niveaux contenus dans les bibliothèques ne sont jamais complets. Ils deviennent mêmes inexistantes lorsque le noyau traité s'éloigne de la vallée de la stabilité. Pour les noyaux usuels situés dans ou à proximité de celle-ci, l'énergie jusqu'à laquelle le schéma de niveaux est complet diminue avec la masse du noyau. Ainsi, dans la bibliothèque RIPL3, le schéma de niveaux du  $^{56}\text{Fe}$  est considéré comme complet jusqu'à une énergie de 5.3 MeV tandis que pour l' $^{238}\text{U}$  cette énergie n'est que de 1.47 MeV.

Le modèle de Gilbert et Cameron permet, à défaut du schéma de niveaux exact, de calculer la densité de niveaux quelle que soit l'énergie d'excitation, le spin et la parité. Ce modèle est divisé en deux parties. En dessous d'une énergie  $E_{match}$ , la densité de niveaux augmente exponentiellement en suivant le modèle de la température constante:

$$\rho_{GCCM}(E) = \rho_{CTM}(E) = \frac{1}{T} \exp((E - E_0)/T)$$

Avec  $E_0$  et  $T$  des paramètres ajustables.

Au delà de l'énergie  $E_{match}$  la densité de niveaux augmente selon le modèle du *backshifted Fermi gas* :

$$\rho_{GCCM}(E) = \rho_{BFM}(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{\exp(2\sqrt{aU})}{a^{1/4}U^{5/4}}$$

Avec :

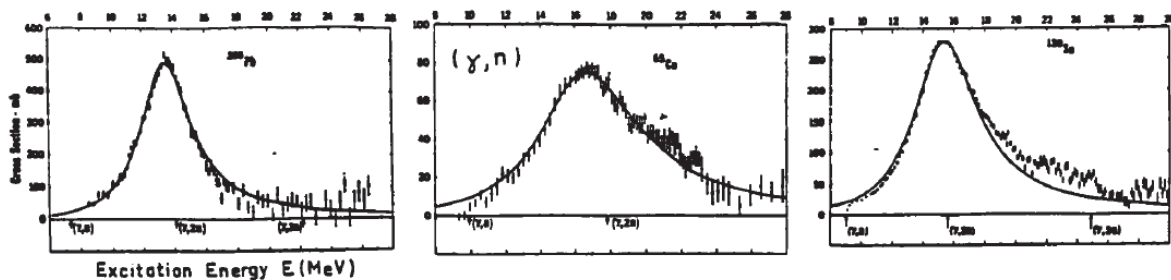
- $a$  est le paramètre de densité de niveaux. Ce paramètre peut-être déduit de la densité de résonances autour de  $S_n$  ou obtenu à l'aide de valeurs systématiques
- $\sigma$  est le *spin-cutoff*. Il est caractéristique de la dispersion en spin et en parité des niveaux nucléaires. Ce paramètre est obtenu à l'aide de systématiques sur lesquelles subsiste une très forte incertitude.
- $U$  est l'énergie effective. Elle est une fonction de l'énergie d'excitation  $E$  prenant en compte les effets d'appariement par paire des nucléons du noyau.

Les paramètres du modèle de température constante et l'énergie  $E_{match}$  s'ajuste en supposant la continuité de la densité de niveaux et de sa dérivée en tous points. Une troisième équation d'ajustement est obtenue en intégrant la fonction de densité de niveaux sur un intervalle de basse énergie et en la comparant au nombre de niveaux tabulés. Si le schéma de niveau est trop mal connu pour pouvoir effectuer cette méthode, il est possible d'utiliser des valeurs systématiques.

#### V.2.iii.b Le modèle de la Enhanced Generalized Lorentzian (EGLO)

La plupart des modèles de fonction de force se basent sur les mesures de ce que l'on appelle la résonance dipolaire géante (GDR<sup>39</sup>). Il a été constaté que les noyaux absorbent fortement les photons à des énergies situées autour de 15 MeV. La variation de la section efficace de photoabsorption prend une forme de lorentzienne dont la largeur est de quelques MeV. Nous pouvons voir sur la Figure V-4 les sections efficaces de photoabsorption du <sup>208</sup>Pb, de <sup>120</sup>Sn et du <sup>65</sup>Cu[64]. Les paramètres de cette résonance sont tabulés et disponibles dans la littérature pour la plupart des noyaux connus. En théorie, il existe une GDR différente associée à chaque multipolarité photonique (GMR par exemple) mais dans les faits la résonance associée aux photons de multipolarité E1 est prédominante. Les paramètres des autres résonances sont rarement mesurés.

Figure V-4 Section d'absorption photonique du <sup>208</sup>Pb, <sup>120</sup>Sn, <sup>65</sup>Cu



Il est possible de définir une fonction de force de photoabsorption. Celle-ci peut être reconstruite à partir des paramètres de la résonance dipolaire géante (énergie et largeur de résonance) ainsi que de paramètres d'ajustement. En effectuant deux hypothèses simplificatrices, il est possible de déduire la fonction de force d'émission gamma (celle qui nous intéresse pour pouvoir calculer les coefficients de transmission) de la fonction de force de photoabsorption. Ces deux hypothèses sont :

<sup>39</sup> Giant Dipole Resonance

- La photoabsorption est un phénomène réversible. Ainsi, la fonction de force de photoabsorption d'un photon d'énergie  $E_\gamma$  par un noyau passant de son état fondamental à un niveau d'énergie  $E_\gamma$  est égal à la fonction de force d'émission gamma d'un noyau se désexcitant d'un état d'énergie  $E_\gamma$  vers son état fondamental en émettant un photon d'énergie  $E_\gamma$ .
- Les fonctions de force ne dépendent que de l'énergie du photon émis et pas de l'énergie du niveau de départ.

Ces deux hypothèses peuvent se résumer avec l'équation suivante :

$$\vec{f}_{XL, E_\gamma + E_x \rightarrow E_x}(E_\gamma) = \vec{f}_{XL, E_\gamma \rightarrow 0}(E_\gamma) = \vec{f}_{XL, 0 \rightarrow E_\gamma}(E_\gamma)$$

Le modèle EGLO donne une expression de cette fonction de force :

$$\vec{f}(E_\gamma) = 8.674 \cdot 10^{-8} \times \sigma_r \Gamma_r \left[ \frac{E_\gamma \Gamma_K(E_\gamma, T_f)}{(E_\gamma^2 - E_r^2)^2 + E_\gamma^2 \Gamma_K^2(E_\gamma, T_f)} + \frac{0.7 \Gamma_K(E_\gamma = 0, T_i)}{E_r^3} \right]$$

Cette équation contient deux termes :

- Le premier terme est déduit de la reconstruction de la section de photoabsorption à partir des paramètres de la GDR.  $E_r$  est l'énergie de la résonance et  $\Gamma_K$  correspond à la largeur de résonance corrigées pour prendre en compte l'énergie du photon  $\gamma$  et la température nucléaire. La GDR n'apparaissant qu'avec des photons  $\gamma$  de hautes énergies (sur la Figure V-4 les mesures ne commencent toutes qu'à partir de 6 MeV), ce terme est insuffisant pour permettre de décrire les fonctions de force aux plus faibles énergies.
- Le deuxième terme est donc un facteur correctif permettant de reproduire le comportement des transitions  $\gamma$  de basse énergie avec la fonction de force.

#### V.2.iv Quelques codes de simulation des réactions nucléaires

Il existe de nombreux codes de simulation des réactions nucléaires permettant entre autre de résoudre l'équation du noyau composé et de calculer le spectre de production gamma :

- GNASH[65] est un code américain produit à Los Alamos dont le développement est à présent interrompu depuis les années 90. Certains spectres de production photonique disponibles dans la bibliothèque JEFF3.1.1 (notamment ceux du hafnium) ont été obtenus avec ce code.
- EMPIRE[66] est le code américain qui est le successeur de GNASH. Dans la bibliothèque ENDF/B-VII, un grand nombre de spectre de production de particules ont été calculés avec ce code.
- TALYS[60] est l'équivalent européen d'EMPIRE et se base également sur les développements antérieurs de GNASH. Il est développé conjointement entre le CEA/DAM et NRG (Pays-Bas). Le langage de programmation est le FORTRAN. Un second code nommé TEFAL est développé en parallèle avec TALYS. Il permet de convertir les résultats obtenus avec TALYS (sections efficaces, spectres, ...) au format ENDF. Chaque année, une bibliothèque de données nucléaires nommée TENDL est entièrement produite avec TALYS et TEFAL. Elle contient toutes les données usuelles que l'on trouve dans les autres bibliothèques. Dans la bibliothèque JEFF3.1.2, comme nous l'avons déjà dit dans le chapitre 4, les

produits de fission, qui ne possédaient pas de spectres de production  $\gamma$ , ont intégré les spectres disponibles dans la bibliothèque TENDL-2011.

- CCONE[67] est un code développé au Japon. Une grande partie des spectres de production de particules disponibles dans la bibliothèque JENDL-4.0 ont été produits avec ce code.

Ces 4 codes sont déterministes. D'autres permettent également de calculer le spectre de production  $\gamma$  avec une méthode Monte Carlo :

- Dice box est l'un des premiers codes ayant permis de calculer des spectres de production de capture radiative par méthode Monte Carlo. Il a été développé dans les années 90 à l'université de Prague par Becvar et Ulbig[68]. Ce code fait à présent office de référence dans le domaine du calcul de la cascade  $\gamma$  par méthode Monte Carlo.
- FIFRELIN[69] est un code de modélisation des processus de fission actuellement en développement au CEA Cadarache. Il permet entre autres de calculer le spectre de  $\gamma$  prompt de fission d'un noyau en appliquant un processus de type similaire à Dice box appliqué à la décroissance de chaque fragment de fission. Ce code peut potentiellement être utilisé pour calculer les spectres de production photonique après une capture radiative.

### **V.3 Les nouvelles évaluations**

Nous avons identifié un certain nombre de noyaux pour lesquels les spectres de production photonique de capture radiative étaient erronés ou manquants. 16 noyaux ont été sélectionnés pour leurs importances respectives dans un réacteur nucléaire : le  $^{54}\text{Fe}$ , le  $^{56}\text{Fe}$ , le  $^{57}\text{Fe}$ , le  $^{58}\text{Fe}$ , l' $^{107}\text{Ag}$ , l' $^{109}\text{Ag}$ , l' $^{113}\text{In}$ , l' $^{115}\text{In}$ , le  $^{113}\text{Cd}$ , le  $^{174}\text{Hf}$ , le  $^{176}\text{Hf}$ , le  $^{177}\text{Hf}$ , le  $^{178}\text{Hf}$ , le  $^{180}\text{Hf}$ , le  $^{155}\text{Gd}$  et le  $^{157}\text{Gd}$ . Pour chacun de ces noyaux, nous allons produire de nouvelles évaluations dans lesquelles de nouveaux spectres de capture radiative seront insérés. La partie neutronique (section efficace, Q de réaction, ...) restera quant à elle inchangée.

#### **V.3.i Production de nouvelles évaluations combinant le code TALYS et les évaluations EGAF**

Pour une question de cohérence entre les différentes données liées à la capture radiative au sein d'une même évaluation, les multiplicités et les spectres de production photonique sont déclarés sur le même intervalle que celui des sections efficaces neutroniques. Par contre, le maillage énergétique du neutron incident n'est pas imposé. Souvent, cet intervalle énergétique s'étend de 25  $\mu\text{eV}$  à 20 MeV. Dans le cas du  $^{56}\text{Fe}$ , cet intervalle s'étend jusqu'à 200 MeV car ce matériau est utilisé dans les structures des accélérateurs de particules et peut subir des irradiations atteignant cette énergie. Il est d'ailleurs indiqué en MF1-MT451, que les données nucléaires associées aux grandes énergies neutroniques (>20 MeV) ont été produites dans le cadre d'une collaboration avec l'HINDAS qui est un programme européen de production de données pour les accélérateurs de particule. Les spectres de capture radiative doivent bien évidemment être proposés sur le même intervalle d'énergie.

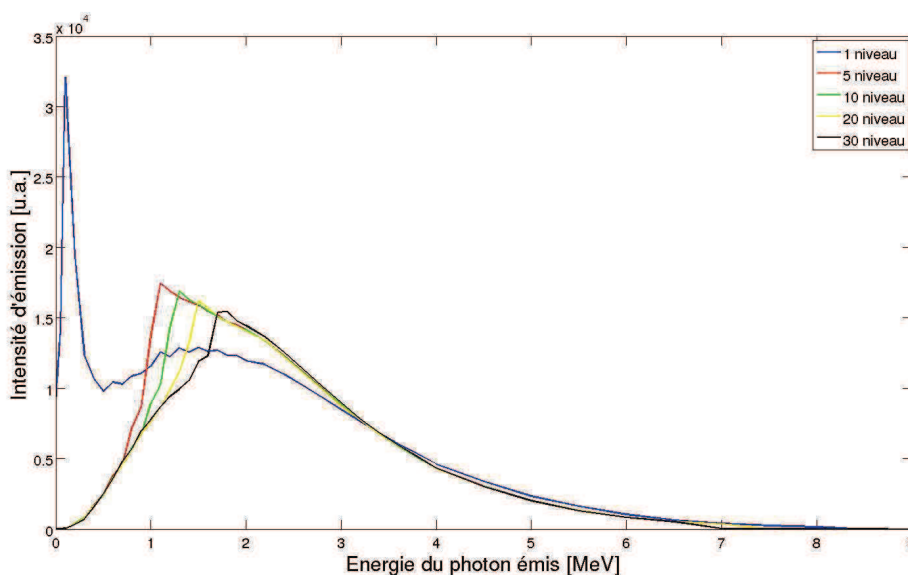
Nous avons choisi de calculer 61 spectres de production de  $\gamma$  pour 61 énergies neutroniques différentes. Nous avons décidé de les insérer en MF6-MT102 dans les fichiers ENDF. Le choix de cet emplacement nous a été imposé par le code TEFAL. La version utilisée au moment de la production des nouvelles évaluations ne permettait pas de les insérer en MF12-14-15.

Les neutrons dont l'énergie se situe dans l'intervalle compris entre 25  $\mu\text{eV}$  et 1 keV contribuent à près de 95% des captures radiatives. Dans cet intervalle d'énergie, nous avons



inséré dans les évaluations un spectre composé des mesures EGAF combinées si besoin avec un calcul TALYS. Le spectre discret contient les mesures contenues dans la bibliothèque EGAF sans changer ni les intensités, ni les énergies des émissions  $\gamma$ . Si ce spectre ne dissipe pas toute l'énergie disponible lors de la réaction de capture radiative, nous le complétons avec un calcul TALYS. Nous simulons une capture radiative d'un neutron de 1 keV en prenant en compte les trente premiers niveaux excités du noyau résiduel. Le spectre calculé par TALYS puis mis au format ENDF par TEFAL contient donc une partie continue et une partie discrète. Nous considérons que la partie discrète est déjà très bien décrite par EGAF et nous ne gardons que la partie continue que l'on renormalise à l'énergie dissipée manquante dans le spectre EGAF.

Nous avons choisi dans le calcul TALYS de prendre en compte le maximum de niveaux discrets possibles pour la simulation de la cascade  $\gamma$  car le spectre continu en est très dépendant. Nous pouvons le voir sur la Figure V-5 sur laquelle nous avons tracé le spectre continu en fonction de ce nombre de niveaux pour la capture neutronique du  $^{155}\text{Gd}$  à 1 keV. Nous pouvons voir que l'augmentation du nombre de niveaux pris en compte a tendance à faire basculer le maximum du continuum vers les hautes énergies. Sur le spectre mesuré par Groshev sur la Figure V-1, nous pouvions constater que le maximum du continuum était situé aux alentours de 2.8 MeV. Nous nous approchons de cette valeur à mesure que le nombre de niveaux discrets pris en compte est important. Avec 30 niveaux, le maximum permis par la version de TALYS utilisée au moment de la production des nouvelles évaluations, le maximum du continuum était centré sur 2 MeV.



**Figure V-5 Spectre continu de capture neutronique du  $^{155}\text{Gd}(n_{1\text{ keV}}, \gamma)$  en fonction du nombre de niveaux discrets**

Au-delà de 1 keV, les spectres mesurés par EGAF ne permettent plus de décrire correctement la cascade de transition de  $\gamma$  après la capture. En effet, de nouvelles transitions  $\gamma$  de hautes énergies deviennent accessible à mesure que l'énergie initiale du noyau composé augmente. L'énergie maximale des photons mesurés dans EGAF ne dépasse jamais  $S_n$ . Par conséquent, les spectres insérés entre 1 keV et 20 MeV (ou 200 MeV) ne sont issus que d'un calcul TALYS dans lequel nous avons pris en compte 30 niveaux discrets pour le noyau résiduel.

Ce travail est décrit dans deux articles de conférence disponibles dans les références [70] et [71] ainsi que dans les documents de travail (JEFF/DOC) [73] et [74].



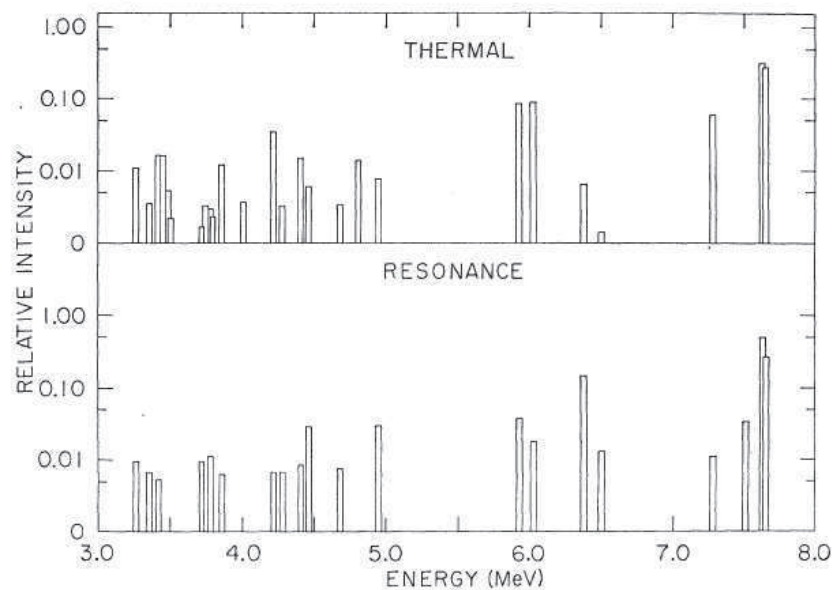
### V.3.ii Limitation de cette méthode de production

Nous ne traiterons ici que la limitation de cette méthode de production vis-à-vis du spectre de  $\gamma$  induit par des neutrons thermiques puisqu'il sera émis lors de 95% des captures.

Nous avons déjà exposé les limitations sur le calcul du continuum liées au nombre de niveaux discrets pris en compte.

Une seconde limitation vient du fait que l'on considère le spectre comme constant dans l'intervalle d'énergie allant de 25  $\mu\text{eV}$  à 1 keV. Cette approximation a été effectuée pour des raisons liées à un manque de mesures plutôt que sur des considérations physiques. En effet, dans cet intervalle énergétique, il est possible de distinguer deux types de capture radiative du neutron : la capture thermique et la capture résonnante. Physiquement, le noyau composé issu de ces deux types de capture sera de même nature mais son moment orbital pourra être différent. Dans le modèle de décroissance de Hauser-Feshbach, nous avons vu que les fonctions de forces dépendaient fortement de la multipolarité du photon émis. Par conséquent, deux niveaux d'énergie identique mais dont le spin et la parité sont différents ne conduiront pas à la même cascade  $\gamma$ . Les coefficients de transmissions à partir de ce niveau ne seront pas les mêmes.

Des différences avaient déjà été observées entre les spectres de capture thermique et résonnante du  $^{56}\text{Fe}$  dans les années 1970[72]. Les spectres thermiques et résonnants mesurés sont représentés sur la Figure V-5. On peut constater que les intensités des pics diffèrent entre les deux spectres.



**Figure V-6 Spectres émis suite à la réaction  $(n,\gamma)$  avec un neutron thermique et un neutron de 1.15 keV capturé par la première résonance de capture du  $^{56}\text{Fe}$**

Un travail de thèse avait été effectué sur la capture radiative du Gd. Les résultats sont disponibles dans la référence[75].

### V.3.iii Comparaison des nouveaux spectres avec les autres évaluations

Nous souhaitons comparer les spectres contenus dans les nouvelles évaluations proposées avec ceux qui sont disponibles dans les autres bibliothèques de données nucléaires. Cette comparaison se limite aux spectres thermiques puisque ceux-ci représentent la majorité des captures radiatives.

Cette comparaison spectre à spectre n'est pas simple à effectuer. En effet, les nouvelles évaluations contiennent des pics discrets alors que les autres n'en contiennent que rarement. De plus, les maillages énergétiques utilisés pour la partie continue ne sont pas harmonisés entre toutes les évaluations. Ils peuvent être très fins comme très grossiers. Par conséquent, pour les comparaisons, tous les spectres ont été condensés sur un même maillage énergétique à 94 groupes. Ce maillage est celui utilisé par le code NJOY lors de la mise en groupe des sections efficaces photoniques.

Pour effectuer cette condensation sans erreur, nous avons utilisé le code TRIPOLI4. Dans ce calcul, un neutron d'énergie  $1.1 \cdot 10^{-11}$  MeV est simulé dans un matériau infini composé uniquement du noyau étudié. Nous récupérons le spectre de production photonique sur 94 groupes grâce à la sortie de TRIPOLI4 nommée « PHOTON PRODUCTION FROM NEUTRON SECONDARY\_SPECTRUM ».

Nous avons représenté quelques spectres obtenus dans les sous-paragraphe suivants. Le reste est disponible dans l'annexe B.

#### V.3.iii.a Nouvelles évaluations du $^{54}\text{Fe}$

Nous avons représenté les spectres obtenus dans le cas du  $^{54}\text{Fe}$  sur la Figure V-7. Les mesures EGAF sont disponibles sur la Figure V-8.

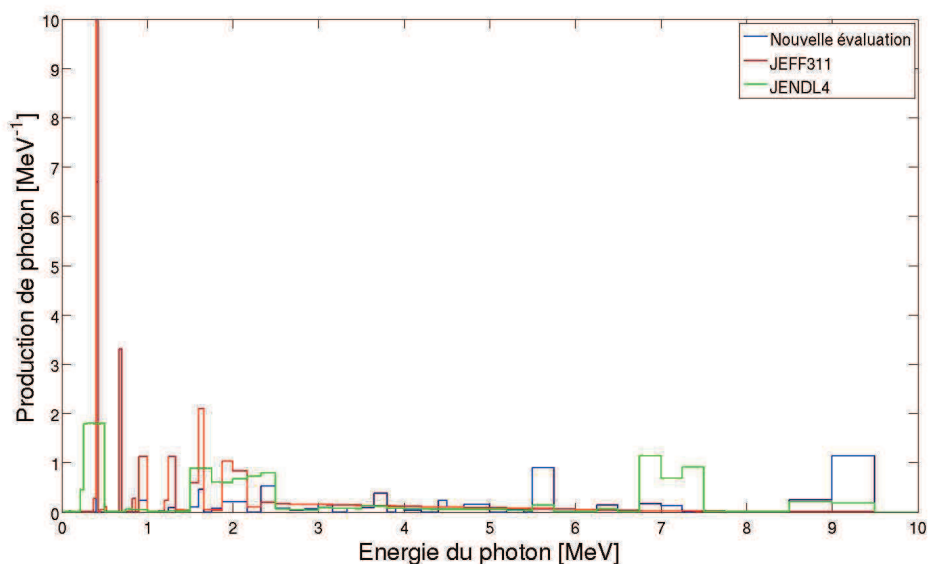
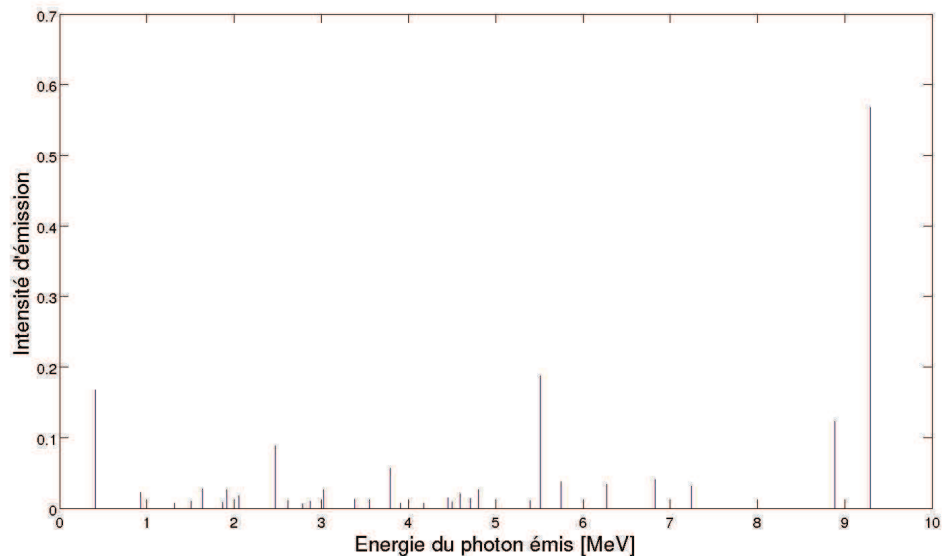


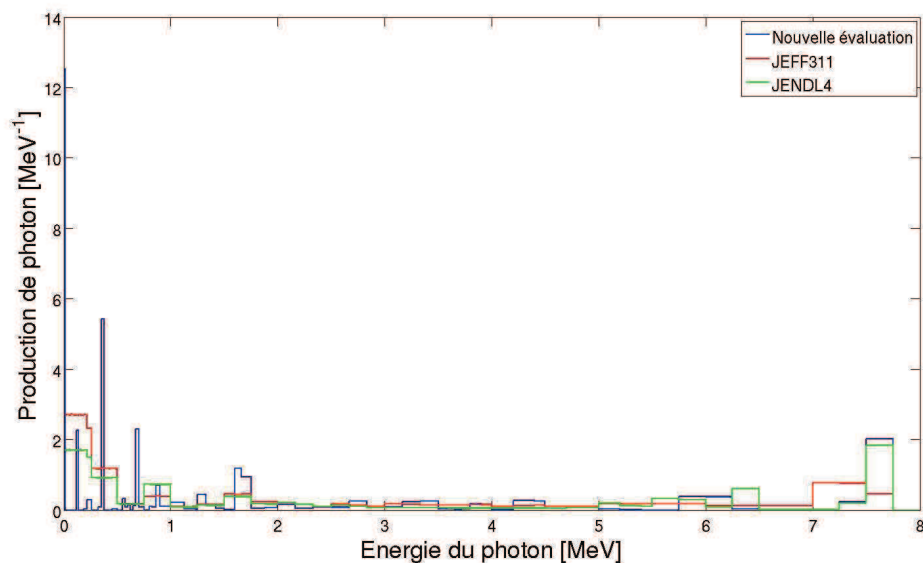
Figure V-7 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{54}\text{Fe}$  avec les autres évaluations



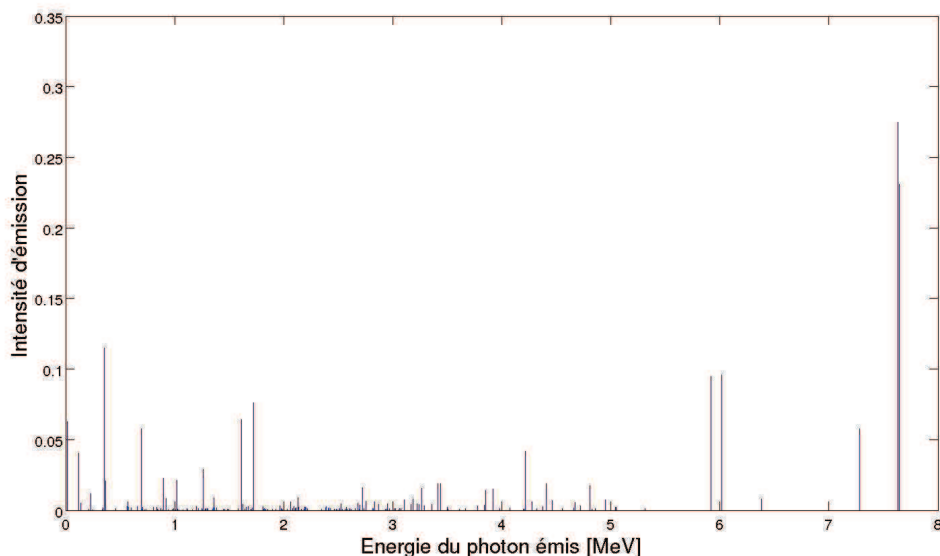
**Figure V-8 Emissions photoniques discrètes du  $^{54}\text{Fe}$  contenues dans EGAF et insérées dans les nouvelles évaluations**

Le spectre thermique du  $^{54}\text{Fe}$  des nouvelles évaluations ne contient que les évaluations EGAF. D'après le chapitre 4, ce spectre était incohérent d'un point de vue énergétique dans la bibliothèque JEFF-3.1.1. Nous pouvons voir que les photons discrets de haute énergie n'étaient pas pris en compte. C'est notamment visible autour de 9 MeV. Les évaluations de JENDL-4.0, qui semblent prendre en compte les photons primaires ne sont pas en accord avec les nouvelles évaluations. En effet, l'intensité du spectre autour de 9 MeV est beaucoup plus faible dans JENDL-4.0. Autour de 7 MeV, l'intensité du spectre JENDL-4.0 est beaucoup plus élevée. Le spectre de JENDL-4.0 est basé uniquement sur un calcul avec le code GNASH.

#### V.3.iii.b Nouvelles évaluations du $^{56}\text{Fe}$



**Figure V-9 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{56}\text{Fe}$  avec les autres évaluations**

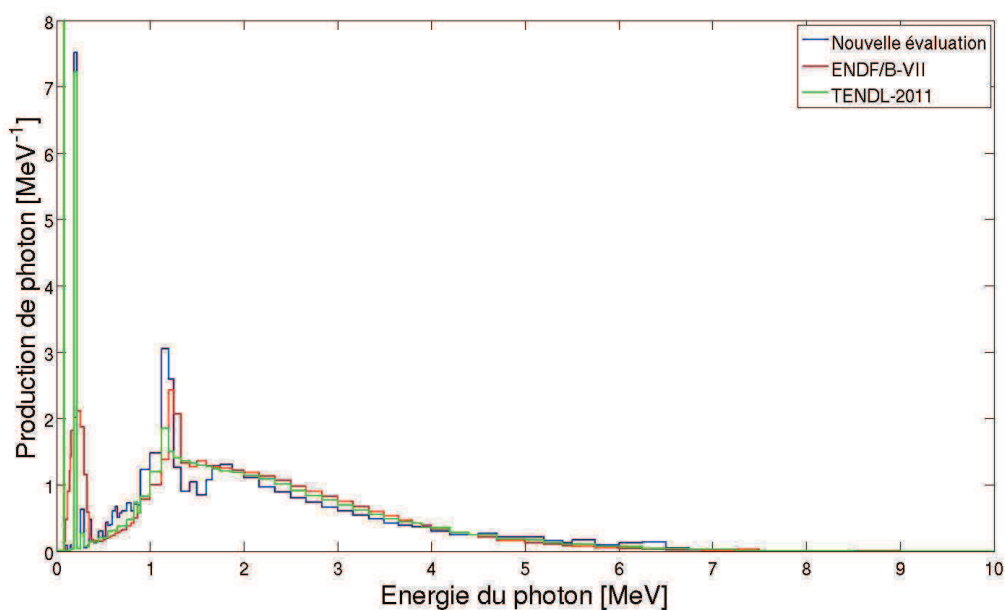


**Figure V-10 Emissions photoniques discrètes du  $^{56}\text{Fe}$  contenues dans EGAF et insérées dans les nouvelles évaluations**

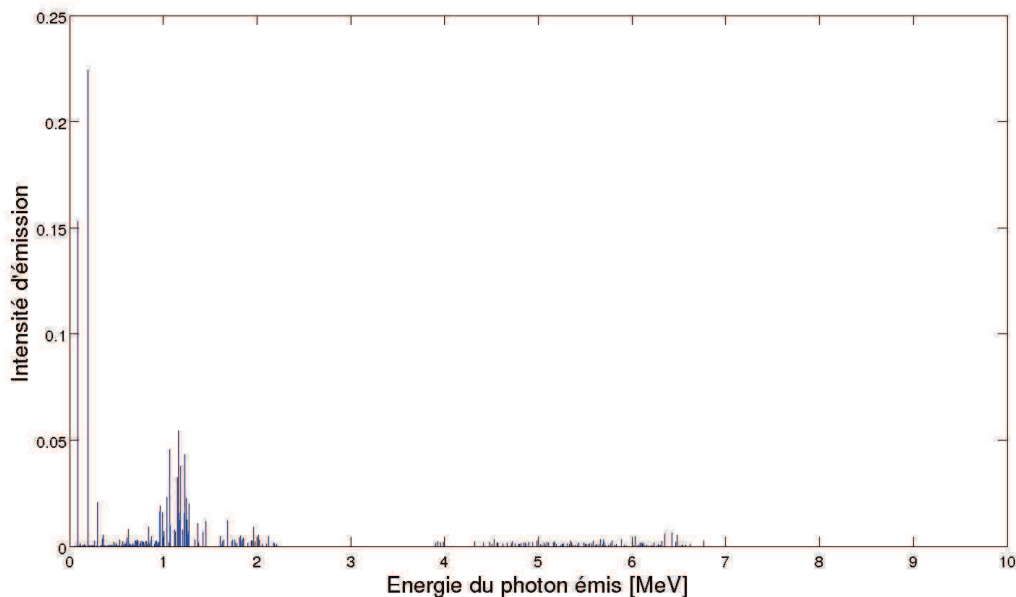
Le spectre  $\gamma$  de capture thermique était cohérent d'un point de vue énergétique dans JEFF-3.1.1. Les nouvelles évaluations et JENDL-4.0 sont en accord sur la production de photon primaire entre 7 et 8 MeV. Les principales différences entre les nouvelles évaluations et JENDL-4.0 semblent provenir du maillage énergétique. En effet, dans les nouvelles évaluations, les photons sont tabulés de manière discrète. Ce n'est pas le cas ni dans JENDL-4.0, ni dans JEFF-3.1.1. Le spectre de JEFF-3.1.1 semble sous-estimer l'intensité du photon émis autour de 7.5 MeV.

Nous pouvons constater que le spectre EGAF ressemble fortement à celui représenté sur la Figure V-6.

#### V.3.iii.c Nouvelles évaluations du $^{155}\text{Gd}$



**Figure V-11 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{155}\text{Gd}$  avec les autres évaluations**



**Figure V-12 Emissions photoniques discrètes du  $^{155}\text{Gd}$  contenues dans EGAF et insérées dans les nouvelles évaluations**

Dans le cas du  $^{155}\text{Gd}$ , la partie continue est prédominante. La comparaison a été effectuée entre les spectres de TENDL-2011 et de ENDF/B-VII. Le choix de TENDL-2011 vient du fait que dans la bibliothèque JEFF-3.1.2, de nouveaux spectres tirés de cette bibliothèque ont été introduits pour tous les produits de fission. Le  $^{155}\text{Gd}$  est un produit de fission donc il contient un spectre  $\gamma$  de capture radiative dans JEFF-3.1.2. Les différences entre les trois bibliothèques ne sont pas très importantes.

#### **V.3.iv Influence des nouveaux spectres sur les échauffements photoniques.**

Nous avons voulu estimer les changements induits par les nouvelles évaluations sur l'énergie photonique déposée localement dans la matière suite à une capture radiative. Pour cela, nous avons effectué un calcul TRIPOLI simple. Nous simulons une sphère d'un matériau donné au centre de laquelle nous insérons un neutron dont l'énergie est de  $1.1 \cdot 10^{-11}$  MeV. A cette énergie, le neutron est immédiatement capturé et des photons  $\gamma$  de capture thermique sont émis. La sphère considérée mesure 10 cm de rayon. Nous l'avons fragmenté en 10 couches d'épaisseur 1 cm dans lesquelles nous avons calculé l'énergie déposée par les photons  $\gamma$  grâce à la réponse de TRPOLI nommée « DEPOSITED\_ENERGY ». Nous avons effectué ce calcul avec les nouvelles évaluations et celles contenues dans JEFF-3.1.1 pour trois matériaux différents :

- Du  $^{54}\text{Fe}$  de densité identique à l'acier,
- Du  $^{56}\text{Fe}$  de densité identique à l'acier,
- De l'acier.

Les résultats sont représentés sur les Figure V-13, Figure V-14, Figure V-15.

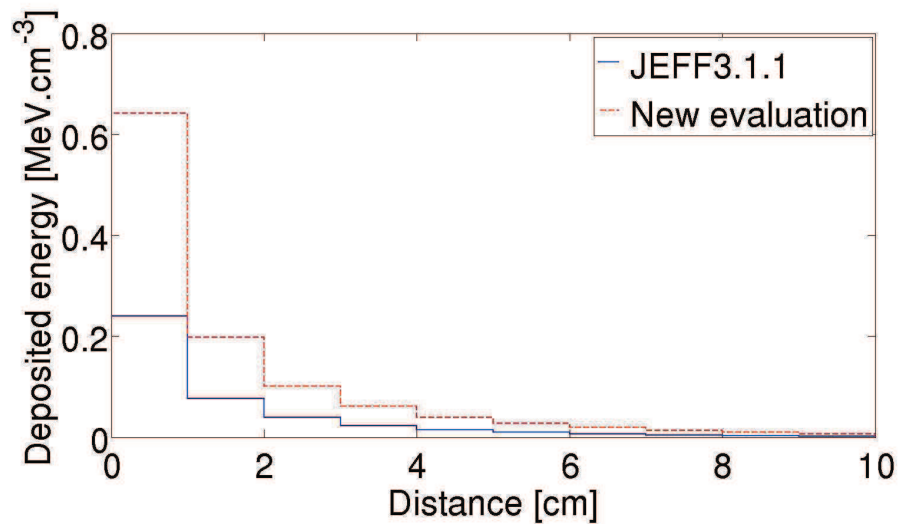


Figure V-13 Propagation et dépôt d'énergie de la source de capture dans le <sup>54</sup>Fe avec les anciennes et les nouvelles évaluations

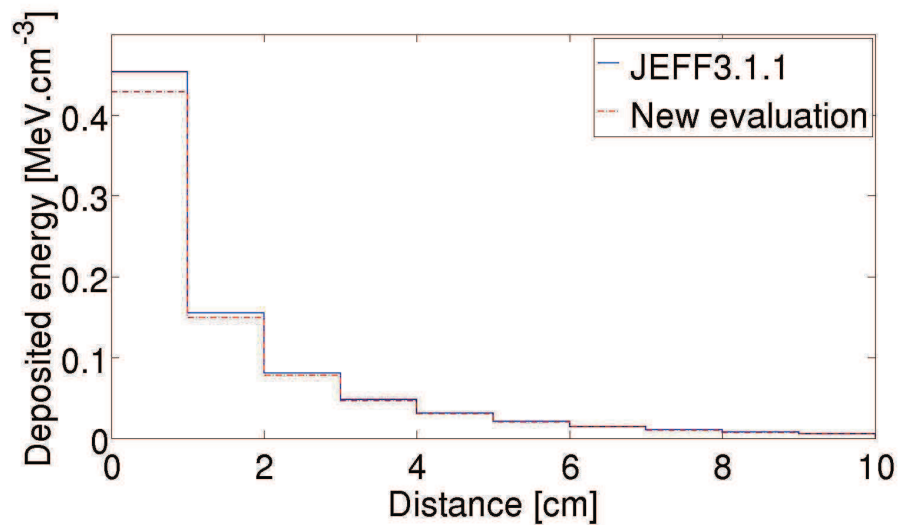


Figure V-14 Propagation et dépôt d'énergie de la source de capture dans le <sup>56</sup>Fe avec les anciennes et les nouvelles évaluations

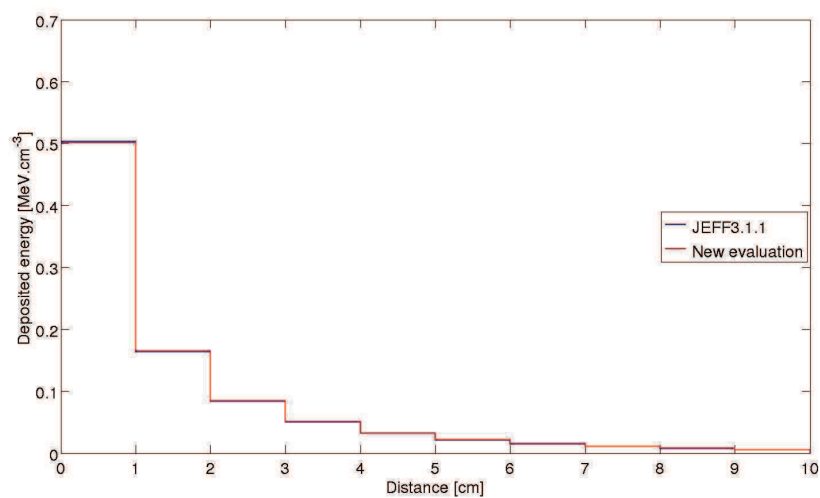


Figure V-15 Propagation et dépôt d'énergie du source de capture dans l'acier avec les anciennes et les nouvelles évaluations

Dans le cas du  $^{54}\text{Fe}$ , le problème de l'énergie manquante dans JEFF-3.1.1 a été résolu. C'est pourquoi l'énergie déposée par les  $\gamma$  de capture est beaucoup plus importante avec les nouvelles évaluations. Sur l'ensemble de la sphère l'énergie déposée avec les nouvelles évaluations est 1.7 fois plus importantes qu'avec l'ancienne.

Dans le cas du  $^{56}\text{Fe}$ , le nouveau spectre de capture radiative a été décalé vers les hautes énergies. Le précédent spectre était cohérent d'un point de vue énergétique pour la capture thermique. Les photons étant plus énergétiques, nous constatons que leurs libres parcours moyens sont plus élevés. Ainsi, l'énergie déposée dans la première couche de la sphère a été diminuée d'environ 6% dans les nouvelles évaluations. Au total, dans l'ensemble de la sphère, la dose déposée a diminuée 3.3%.

Dans le cas de l'acier, les nouvelles évaluations sont responsables d'une augmentation de la dose déposée de 1.4%. Localement, au centre, l'effet du  $^{56}\text{Fe}$  est prédominant et induit une diminution totale de la dose déposée d'environ -0.3%. En s'éloignant du centre, les effets des autres isotopes du fer deviennent prépondérants et on observe une augmentation de la dose déposée d'environ 3% dans la dernière coquille de la sphère simulée.



## Chapitre VI Le programme expérimental PERLE

PERLE est l'acronyme de « Programme d'Etude du Réflecteur Lourd dans Eole ». Ce programme expérimental, qui s'est achevé en 2009, a été conçu afin d'étudier les comportements neutroniques et photoniques induits par l'introduction d'un réflecteur lourd dans un réacteur nucléaire. Il consistait en une série de mesures effectuées sur un cœur assemblé dans la maquette critique EOLE située au CEA Cadarache. Les objectifs de ce programme étaient :

- Obtenir des informations fondamentales de l'effet d'un réflecteur en acier sur les propriétés neutroniques du cœur, et en particulier le gain de réflecteur et de la distribution de puissance à l'interface cœur/réflecteur, à l'aide de spectrométrie gamma et de chambres à fission[76].
- Permettre de qualifier le calcul du flux neutronique aux énergies intermédiaires dans le réflecteur grâce aux mesures par chambres à fission et dosimètres[76], .
- Permettre le retour fondamental sur les sections efficaces du  $^{56}\text{Fe}$ , en particulier de diffusion élastique et inélastique au-delà de 500 keV, et le retour sur la bibliothèque JEFF-3.1.1[77][78].
- Apporter des éléments de validations de l'échauffement  $\gamma$  dans l'acier, au travers des mesures par détecteurs thermoluminescents.

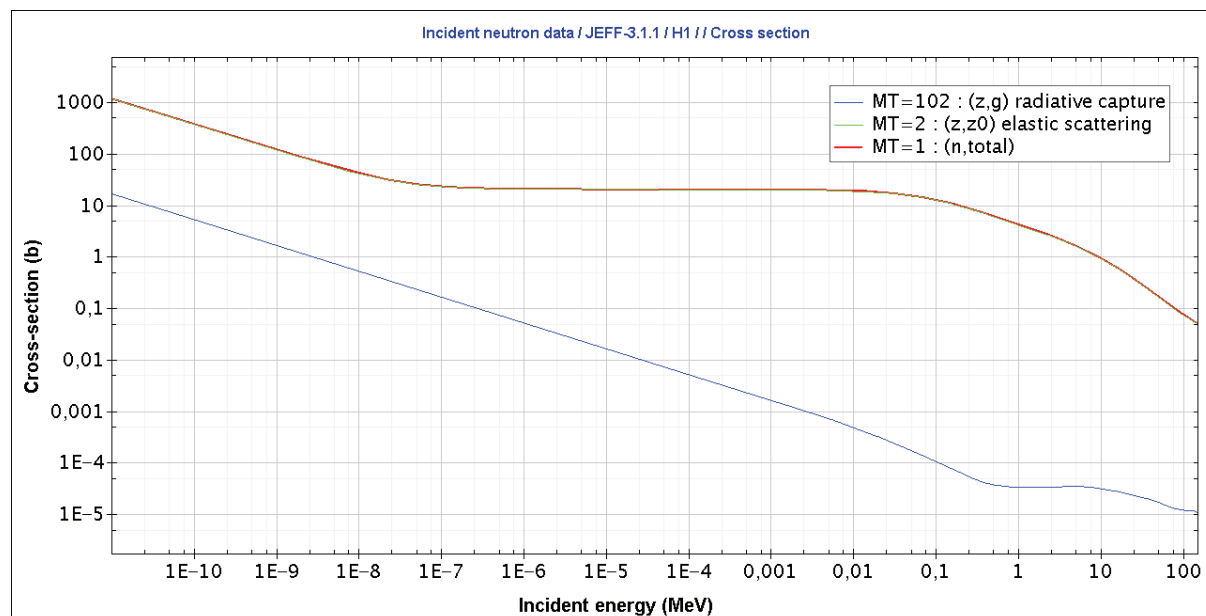
Le dernier enjeu est l'objet de notre étude. Les mesures d'échauffement photonique constituent une base expérimentale permettant de valider la pertinence de la bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1 ainsi que des codes de transport de particules. Celles-ci ont été effectuées d'après les travaux réalisés par David Blanchet durant sa thèse soutenue en 2006 [79].

### **VI.1 Introduction d'un réflecteur lourd en acier dans les réacteurs de troisième génération**

Certains concepts de réacteurs innovants incluent la présence d'un réflecteur lourd en acier. C'est notamment le cas pour le réacteur de 3<sup>ème</sup> génération français EPR[80]. Plusieurs études ont mis en évidence les avantages de l'introduction de ce matériel [81]. Le fonctionnement des réflecteurs des réacteurs nucléaires est basé sur la diffusion des neutrons. Les neutrons sortant de la zone fissile entrent dans le réflecteur. Ils y subissent de nombreuses diffusions élastiques comme inélastiques. Durant chacune de ces interactions, la trajectoire du neutron est déviée d'un angle  $\theta$  dont la distribution dépend d'une loi de probabilité qui est tabulée dans les bibliothèques de données nucléaires. Après un certain nombre de diffusions (qui peut être variable selon les histoires), il est possible que le neutron ressorte du réflecteur et retourne dans la zone fissile. Dans ce cas, ce neutron a été réfléchi. Il pourra potentiellement réagir avec un noyau fissile et ainsi participer à la production d'énergie dans le réacteur. D'après ce principe, les bons réflecteurs sont donc avant tout des matériaux diffusant et peu capturant.

A l'heure actuelle, le réflecteur des réacteurs REP de 2<sup>nde</sup> génération est constitué d'eau modératrice qui est séparée de la zone combustible par un baffle lourd en acier dont l'épaisseur est de quelques centimètres. Ce baffle lourd ceinture la zone fissile. Le réflecteur en eau a l'avantage d'être très peu capturant. Nous pouvons le voir sur la Figure VI-1 sur laquelle sont représentées les sections efficaces de diffusion élastique, de capture radiative et totale de l'hydrogène. Sur cette figure, nous pouvons également constater une diminution de la section de diffusion élastique pour les neutrons dont l'énergie est supérieure à 100 keV et par conséquent du pouvoir diffusant de l'eau. Or, malgré leurs dénominations de réacteur

à neutron thermique, dans les REP, environ 50% des neutrons possèdent une énergie supérieure à 100 keV.



**Figure VI-1 Sections efficaces d'interaction neutronique de l'hydrogène**

Les réflecteurs en acier présentent certains avantages par rapport aux réflecteurs en eau. La Figure VI-2 représente les sections de diffusions élastiques et inélastiques, de capture radiative et totale du  $^{56}\text{Fe}$ . Celles-ci ont un caractère résonant contrairement aux sections de l'hydrogène. Dans le cas de l'hydrogène, la section varie de 12 à 4 barns entre 100 keV et un MeV. Dans le cas du  $^{56}\text{Fe}$ , le principal composant de l'acier, les résonances des sections de diffusion atteignent plus de 10 barns au-delà de 100 keV. Par conséquent, l'acier est un meilleur réflecteur de neutrons épithermiques et rapides que l'eau. L'inconvénient de l'acier est sa section de capture. Contrairement à l'eau, le fer capture les neutrons thermiques bien plus qu'il ne les diffuse. Les réflecteurs en acier doivent donc répondre à certaines contraintes géométriques afin que le pouvoir diffusif devienne prépondérant sur le pouvoir capturant. Une étude menée au Brésil sur la maquette critique IPEN/MB-01[81] a mis en évidence l'existence d'une épaisseur minimale pour que l'acier devienne un bon réflecteur. Pour cela, ils ont mesuré la variation de réactivité induite par l'introduction de plaques en acier autour d'un réseau combustible. Il apparaît que pour une faible épaisseur d'acier, le pouvoir capturant est majoritaire et la réactivité diminue. Ce n'est qu'à partir d'une épaisseur d'à peu près 6 cm que le gain de réactivité par rapport et à une géométrie avec un réflecteur à eau est devenu positif. L'épaisseur optimale du réflecteur au-delà de laquelle la réactivité n'augmente plus est appelée le gain réflecteur.

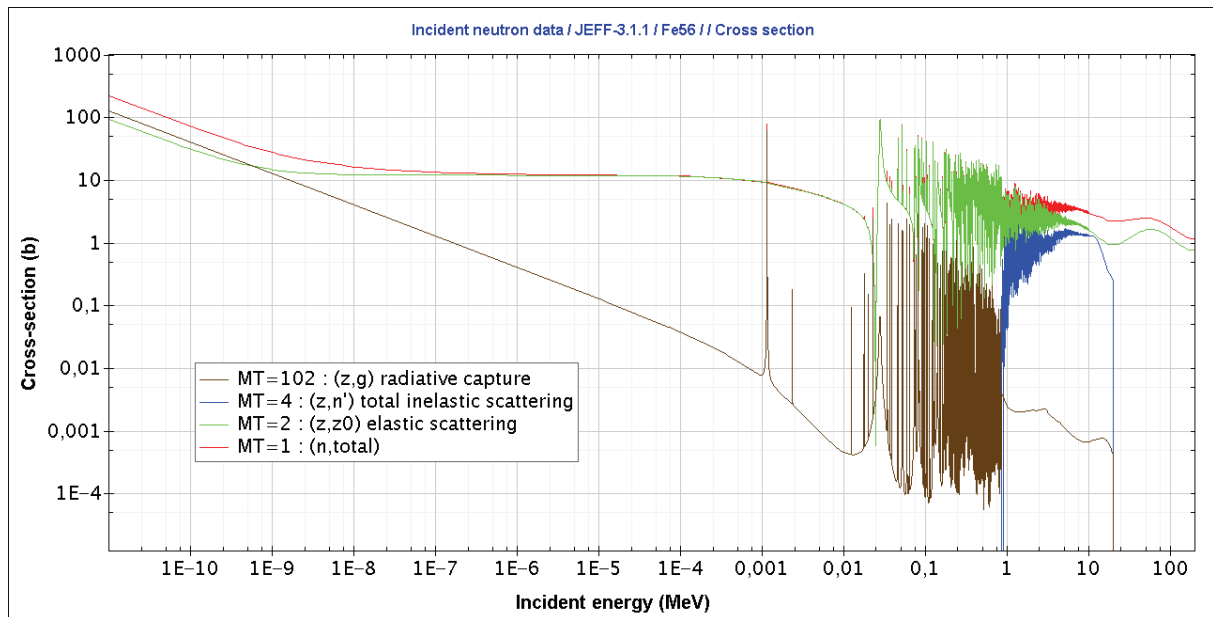


Figure VI-2 Section efficace neutronique du  $^{56}\text{Fe}$

Pour les réacteurs innovants, le réflecteur en acier possède de nombreux avantages :

- Le combustible périphérique est mieux consommé grâce à l'ajout des neutrons réfléchis,
- La fluence de neutrons épithermiques et rapides atteignant la cuve est diminuée, permettant ainsi de diminuer l'endommagement de celle-ci et par conséquent d'augmenter la durée de vie du réacteur,
- La distribution de puissance dans le cœur est plus homogène car la diminution du flux neutronique en périphérie est moins importante.

Les avantages d'un réflecteur en acier permettent donc d'améliorer la rentabilité des réacteurs nucléaires en consommant mieux le combustible et en allongeant la durée de vie. De plus, d'un point de vue sûreté, les cuves sont mieux protégées. Le risque de rupture est donc réduit significativement.

De nombreuses études sont encore nécessaires pour caractériser les effets induits par ce réflecteur en acier. Le programme expérimental PERLE est l'une de ces études.

## VI.2 Caractéristiques du cœur PERLE

Le cœur PERLE est constitué d'un assemblage combustible non conventionnel (ne correspondant pas aux assemblages REP). Cet assemblage est constitué d'un réseau de 27 par 27 emplacements qui sont principalement occupés par des crayons combustibles baignant dans de l'eau borée à une température de 20°C. Les crayons sont maintenus en place par trois minigrilles en aluminium.

Ces crayons combustibles sont constitués de pastilles de combustible de type UOx enrichi à 3.7%. Celles-ci sont les mêmes que celles introduites dans les crayons utilisés dans les réacteurs de puissance. La hauteur fissile est de 80 cm. Les pastilles sont maintenues en place par des cales en aluminium situées de chaque côté de la hauteur fissile. Elles sont entourées d'une gaine en zircaloy qui est elle-même entourée d'une surgaine en aluminium. Cette surgaine permet de reproduire le rapport de modération des

réacteurs de puissance dans lesquels la température du modérateur est d'environ 300°C en diminuant le volume occupé par l'eau.

16 emplacements du réseau sont réservés pour les grappes de sécurité en B<sub>4</sub>C. En fonctionnement normal, pendant la divergence et la stabilisation de la puissance du cœur, toutes ces barres sont en position haute. Par conséquent, on les associe en général à des trous d'eau (une surgaine contenant de l'eau modératrice).

1 emplacement est occupé par une chambre à fission. Celle-ci permet de contrôler la montée en puissance lors de la divergence.

1 dernier emplacement est occupé par une grappe de contrôle en hafnium. Celle-ci permet de contrôler la montée en puissance du cœur PERLE en jouant sur la réactivité. Une fois le palier de puissance atteint, cette barre est toujours partiellement insérée contrairement aux grappes de sécurité.

En fonction de la campagne de mesure, certains crayons combustibles peuvent être remplacés par des instruments de mesure.

Cet assemblage est entouré d'un réflecteur lourd en acier inoxydable qui est caractéristique des baffles lourds introduits dans les réacteurs de 3<sup>ème</sup> génération. Ce réflecteur mesure 80 cm de hauteur et est situé le long de la zone fissile. Il est constitué de 4 blocs parallélépipédiques dont la largeur est de 22 cm. L'un de ces blocs est percé de 29 trous débouchant. En fonction de la campagne de mesure, ces trous peuvent être bouchés par des rondins en acier ou être remplis d'eau modératrice. Ces deux configurations correspondent respectivement aux sous-programmes « PERLE homogène » et « PERLE trou d'eau ». Ces trous reproduisent les canaux de refroidissement du réflecteur des réacteurs de puissance dans lesquels de l'eau circule afin d'évacuer la chaleur.

Nous pouvons voir sur la Figure VI-3 le cœur PERLE assemblé avant immersion et avant insertion des crayons combustibles. On peut voir au centre l'une des minigrilles de maintien des crayons dans l'assemblage. Tout autour, nous distinguons les quatre blocs constituant le baffle lourd. Le bloc de droite est percé des 29 trous débouchant qui seront remplis par de l'eau ou des rondins d'acier en fonction du sous-programme expérimental. Les autres trous, que l'on distingue au centre des blocs de droite et de gauche ainsi que sur l'une des diagonales du cœur, peuvent contenir les instruments de mesure. Si aucune mesure n'est effectuée dans l'un de ces trous durant un palier de puissance, alors ils sont rebouchés avec un rondin d'acier.

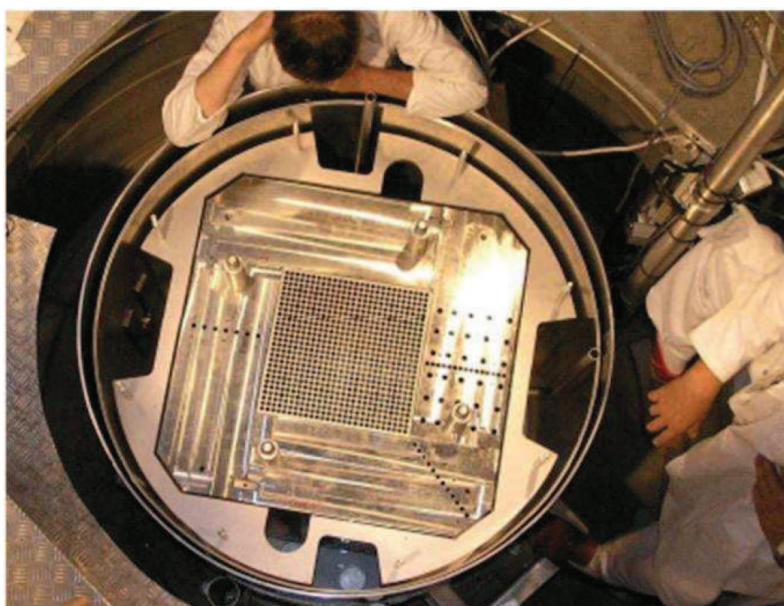


Figure VI-3 Photographie du cœur PERLE

### **VI.3 Mesures de l'échauffement photonique dans le cœur PERLE**

Le programme expérimental PERLE est avant tout une campagne de mesure effectuée dans la maquette critique EOLE pendant des paliers de puissance. 5 paramètres ont été estimés à travers les mesures :

- La distribution radiale de puissance par spectrométrie  $\gamma$  intégrale,
- La distribution axiale de puissance par spectrométrie  $\gamma$  intégrale,
- La distribution radiale de taux de fission à partir des taux de comptage de chambres à fission en  $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$  et en  $^{237}\text{Np}$ ,
- La distribution radiale de flux neutronique en fonction de l'énergie à l'aide de dosimètres à activation,
- La distribution radiale de la dose photonique avec des détecteurs thermoluminescents (TLD).

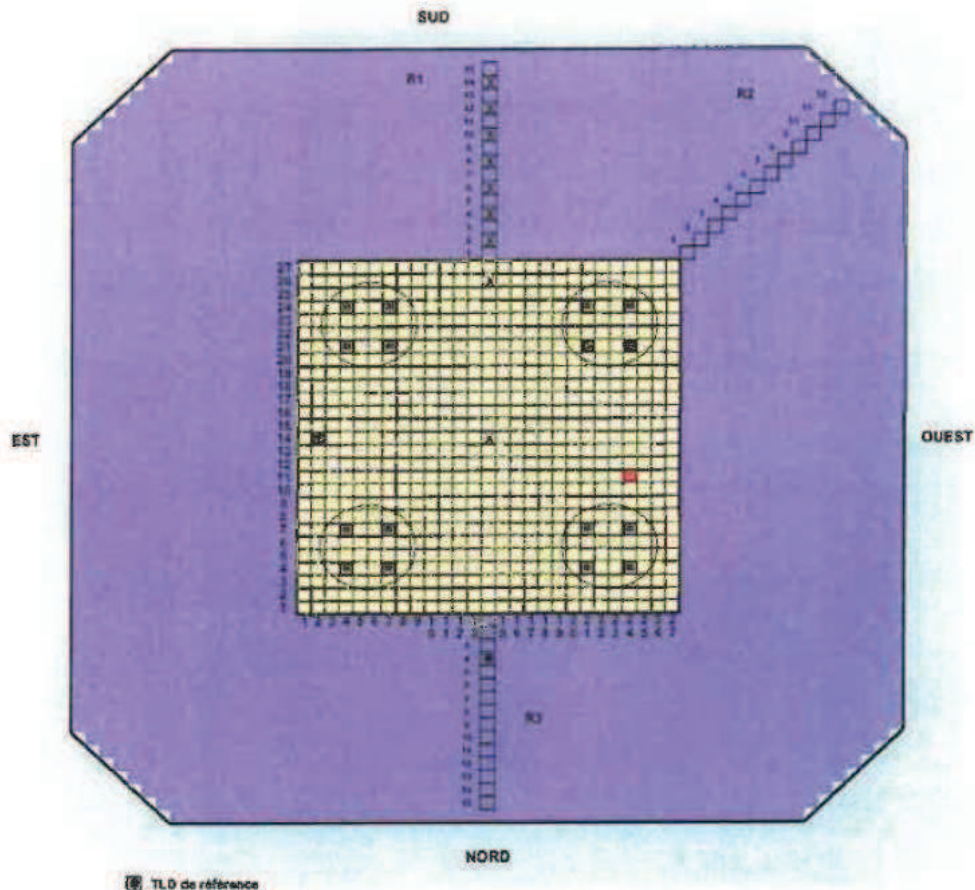
Ce sont ces dernières mesures qui seront interprétées dans les prochains chapitres.

#### **VI.3.i Déroulement des mesures d'échauffement $\gamma$ dans PERLE**

L'échauffement  $\gamma$  a été mesuré dans le cœur PERLE en 10 emplacements alignés qui sont représentés sur la Figure VI-4:

- 2 emplacements se situent dans la partie combustible. Pour les mesures, deux crayons combustibles sont remplacés par des cannes de mesures contenant les TLD. Les deux crayons remplacés sont situés en position centrale du réseau et en périphérie. Leurs positions dans les coordonnées du réseau sont 14-14 et 14-26. Le second point de mesure est donc situé à 16.5 cm du centre du cœur.
- 15 emplacements de mesure ont été prévus dans l'un des réflecteurs (celui qui est situé le plus proche de la mesure périphérique dans la zone fissile). Ces points sont alignés avec l'un des axes centraux du bloc combustible. Ils sont chacun éloignés les uns des autres d'un pas du réseau combustible, soit 1.32 cm. Le premier point de mesure est éloigné de deux pas de réseau du dernier crayon combustible, soit une profondeur de pénétration de 1.98 cm et un éloignement du centre cœur de 19.8 cm. En notant R1 à R15 les emplacements de ces points, les échauffements  $\gamma$  ont été mesurés dans 7 positions allant de R2 à R14 par pas de 2.
- Une dernière mesure d'échauffement  $\gamma$  a été effectuée dans le bloc réflecteur opposé en position R4. Cette mesure servait de référence.





**Figure VI-4 Position des points de mesure dans le cœur PERLE (X)**

Les échauffements  $\gamma$  ont été mesurés durant des divergences du cœur PERLE de 10 minutes à une puissance stabilisée d'environ 10W. Chacun des points de mesures était alors irradié en étant soumis à un flux de photons.

Dans le cadre du sous-programme « PERLE homogène », la mesure de l'échauffement  $\gamma$  a nécessité 8 divergences. Chacune d'entre elles était associée à l'une des mesures dans l'acier ou aux deux mesures dans le combustible. La mesure au niveau du point de référence était systématiquement réalisée en parallèle durant toutes les divergences.

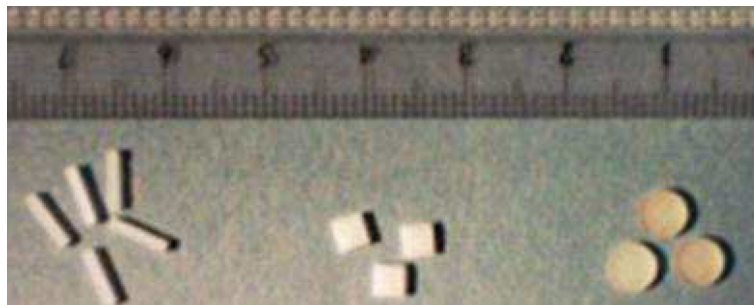
Dans le cadre du sous-programme « PERLE trou d'eau », Seules 4 divergences ont été réalisées. 3 d'entre elles concernaient des mesures simultanées dans le réflecteur et la dernière les mesures dans la zone combustible. La mesure au niveau du point de référence était toujours systématiquement réalisée en parallèle durant toutes les divergences.

Les résultats ont tous été normalisés à 1 au centre du cœur. Afin d'obtenir une mesure de l'échauffement en absolu, une dernière irradiation a été effectuée dans les mêmes conditions au niveau de la position de référence.

Le système de mesure en chaque point est constitué de 4 piluliers en acier contenant chacun trois types de détecteurs thermo-luminescents (TLD) :

- Des TLD cylindriques de types FLi de diamètre 4.5 mm et d'épaisseur 0.8 mm,
- Des TLD carrés de types CaF2 dopés en Mn de côté 3.2 mm et d'épaisseur 0.9 mm,
- Des TLD carrés de types CaF2 dopés en Mn de côté 3.2 mm et d'épaisseur 0.38 mm.

Nous pouvons voir les TLD CaF<sub>2</sub> et FLi au centre et à droite de la Figure VI-5.



**Figure VI-5 Photographie des TLD**

Les piluliers sont contenus dans des cannes. Des cales en acier (dans le réflecteur) et en aluminium (dans la zone fissile) permettent de les centrer sur le plan médian de la zone fissile. Dans l'acier, ces cannes étaient introduites dans des trous situés au niveau des points de mesures. Dans la zone combustible, elles étaient introduites à la place d'un crayon combustible.

### **VI.3.ii Principes des mesures par détecteurs thermo-luminescent**

Les TLD sont des cristaux semi-conducteurs dont l'une des propriétés remarquables est d'« intégrer » les doses  $\gamma$  allant de quelques mGy à quelques Gy. Ces semi-conducteurs sont dopés en défauts électroniques tels que décrits dans le chapitre 2. Pour une explication détaillée du principe de fonctionnement des TLD, le lecteur pourra faire appel à la référence [82]

#### **VI.3.ii.a Piégeage des électrons**

Le comportement des électrons dans un semi-conducteur idéal peut être représenté schématiquement à travers deux bandes d'énergie qui sont dites de valence et de conduction. Ces deux bandes correspondent aux énergies accessibles pour les électrons. Dans la bande de valence, les électrons ont des énergies négatives et sont localisés (c'est-à-dire qu'ils sont liés à un atome). Dans la bande de conduction, les états des électrons sont délocalisés. L'intervalle d'énergie entre les deux bandes est appelé le gap ou la bande interdite. La largeur du gap est l'énergie minimale à fournir à un électron pour qu'il puisse passer de la bande de valence à la bande de conduction. Cette énergie peut être fournie aux électrons par chauffage, à l'aide d'un champ électromagnétique, ou par irradiation. En l'absence d'énergie, les électrons de la bande de conduction retombent spontanément dans la bande de valence.

L'introduction des défauts électroniques dans un semi-conducteur a un impact sur le gap en énergie. L'intervalle énergétique de ce gap est normalement inaccessible pour les électrons. En réalité, les dopants y introduisent des niveaux énergétiques discrets accessibles. Ainsi, en quittant la bande de conduction, les électrons peuvent retomber dans la bande de valence mais également dans l'un de ces états énergétiques discrets. Ceux-ci sont en général situés près de la bande de conduction. On qualifie ces niveaux discrets de pièges électroniques car les électrons les peuplant ne peuvent plus rejoindre la bande de valence sans repasser par la bande de conduction. Ainsi, en l'absence d'irradiation, les électrons peuplant ces niveaux discrets peuvent y rester durant de très longues périodes (des mois voire des années). D'après les hypothèses de Randall et de Wilkins[83], dont les travaux font office de référence dans le domaine de la thermoluminescence, en l'absence d'une source d'énergie autre que la chaleur, l'évolution de la population électronique d'un état discret évolue selon une équation simple :



$$\frac{dN}{dt} = -P(T) \cdot N = -S_0 \exp\left(\frac{-E_0}{k_b T}\right) \cdot N$$

Avec  $E_0$  l'énergie de l'état discret et  $T$  la température en K.  $S_0$  a la dimension d'une fréquence [ $s^{-1}$ ] qui est caractéristique des vibrations atomiques des atomes. D'après cette équation, plus l'énergie du niveau est basse et plus sa population diminue lentement. Les niveaux situés à des énergies très proches de la bande de conduction se dépeuplent donc très rapidement.

Dans le cœur PERLE en fonctionnement, les TLD subissent une irradiation constante de particules qui donneront l'énergie nécessaire aux électrons de valence pour atteindre la bande de conduction. Ceux-ci, en quittant la bande de conduction vont être en partie piégés dans les défauts électroniques. A la fin de l'irradiation, le nombre d'électrons piégés dépendra ainsi de la dose absorbée par le TLD. Ainsi, Pour connaître cette dose, il suffit de trouver une méthode permettant de compter les électrons piégés dans le TLD.

### VI.3.ii.b Interrogation des TLD par chauffage

Lorsqu'un électron est piégé sur un niveau discret, un trou électronique est créé ailleurs dans le cristal. On peut représenter ce trou par un niveau de recombinaison. Les matériaux thermo-luminescents ont la propriété d'émettre un photon X lorsque un électron piégé est libéré et rejoint dans l'un des niveaux de recombinaison.

Cette propriété est à la base des mesures par TLD. Après l'irradiation, les électrons piégés sont libérés et les photons X émis sont comptabilisés à l'aide d'un dispositif photomultiplicateur. Une anode est placée en sortie de ce dispositif et délivre un courant électrique facilement mesurable. Finalement, le courant mesuré dépend de la dose absorbée.

L'énergie nécessaire à la libération des électrons piégés est fournie par la chaleur. Après l'irradiation, les TLD sont placés dans un four et chauffés selon un programme particulier. Ces programmes ont été optimisés et sont propres à chaque type de TLD. D'après l'expression de l'évolution de la population des pièges électroniques donnée dans le paragraphe précédent, nous pouvons déduire l'intensité des photons X émis pour une loi de chauffage particulière :

$$I(t) = -C \cdot \frac{dN}{dT} = C \cdot S_0 \exp\left(\frac{-E_0}{k_b T(t)}\right) \cdot \exp\left(-S_0 \int_0^t \exp\left(\frac{-E_0}{k_b T(t')}\right) dt'\right)$$

La quantité  $C$  est le rendement de thermoluminescence. Si toutes les recombinaisons conduisent à l'émission d'un photon X, alors ce facteur est égal à 1. Dans le cas d'une loi durant laquelle la température évolue linéairement avec le temps, l'expression précédente devient :

$$T(t) = T_0 + \beta \cdot t$$

$$I(t) = -C \cdot \frac{dN}{dT} = C \cdot S_0 \exp\left(\frac{-E_0}{k_b T(t)}\right) \cdot \exp\left(-\frac{S_0}{\beta} \int_{T_0}^{T(t)} \exp\left(\frac{-E_0}{k_b T'}\right) dT'\right)$$

Le principe de fonctionnement d'un TLD est résumé sur la Figure VI-6.

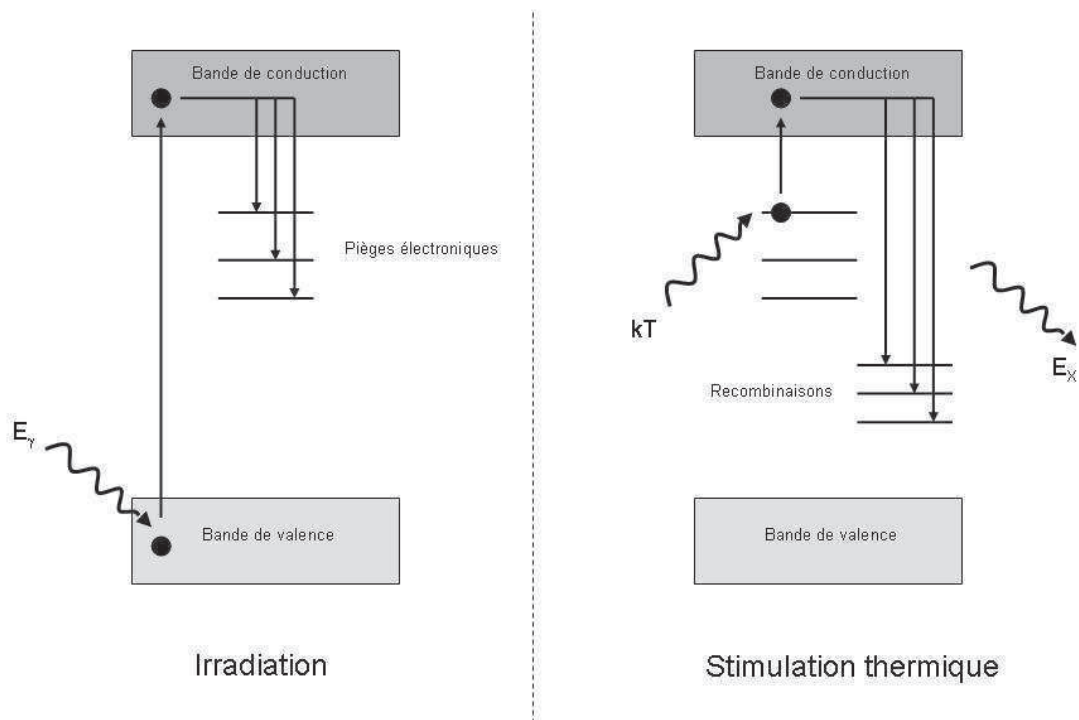


Figure VI-6 Principe de fonctionnement des détecteurs thermo-luminescents

Les lois de chauffage utilisées pour l'interrogation des TLD de type CaF2 et FLi7 sont représentées sur la Figure VI-7. La réponse du TLD est l'intégrale du courant électrique mesuré durant le chauffage. Cette réponse est une charge donnée en nC. Il est plus judicieux de considérer la charge massique moyenne notée  $\bar{Q}_m^s$  donnée en nC.g<sup>-1</sup>. Elle est obtenue en moyennant sur toutes les réponses des TLD de même type.

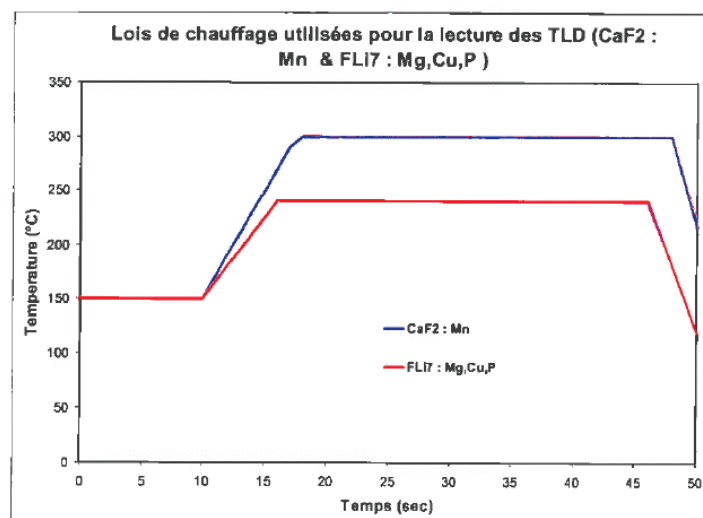


Figure VI-7 Lois de chauffage utilisées pour la lecture des TLD

### VI.3.ii.c Calibration des TLD

Pour analyser la réponse des TLD en absolu, il faudrait connaître au minimum :

- Les énergies de chaque niveau piège discret,
- Le rendement de thermoluminescence
- L'efficacité du photomultiplicateur

Dans les faits, une phase de calibration est indispensable pour s'affranchir du calcul de chacune de ces quantités.

La calibration des TLD est effectuée à l'aide d'une source de  $^{60}\text{Co}$  et d'une chambre d'ionisation. Le  $^{60}\text{Co}$  est un noyau radioactif  $\beta$  dont la période est d'un peu plus de 5 ans. En se désintégrant, il émet deux photons  $\gamma$  de 1.17 et de 1.33 MeV. La chambre d'ionisation permet de mesurer le KERMA instantané dans l'air et est visible sur la Figure VI-8.

**Figure VI-8 Chambre d'ionisation  $\gamma$**



Les TLD sont mis en présence de la source de  $^{60}\text{Co}$  durant différents temps d'irradiation afin d'intégrer différentes doses  $\gamma$ . Le KERMA air est mesuré à l'aide de la chambre d'ionisation au même emplacement que les piluliers. Après interrogation, les réponses des TLD en nC sont rapportées au KERMA air mesuré.

Le KERMA air n'est pas la dose déposée dans le TLD. Pour calculer le facteur permettant de passer de l'un à l'autre, deux calculs MCNP ont été effectués dans lesquels le KERMA air et la dose ont été estimés. Le rapport de ces deux quantités calculées constitue le facteur de passage :

$$C^{calib} = \frac{K_{air}^{calib}}{E_D^{calib}}$$

Finalement, en partant du principe que la réponse des TLD évolue linéairement avec la dose absorbée (nous reviendrons plus tard sur cette approximation), la charge massique mesurée lors de l'interrogation des TLD dépend de la dose déposée selon l'équation :

$$\begin{aligned} \bar{Q}_m^s &= a \cdot K_{air}^{calib} + b = a \cdot C^{calib} \cdot E_D^{calib} + b \\ E_D^{calib} &= \frac{1}{C^{calib}} \cdot \frac{\bar{Q}_m^s - b}{a} \end{aligned}$$

En réalité, il conviendrait d'ajouter à la charge massique un terme de bruit de fond et la multiplier par un facteur dit de fading caractéristique de la diminution « naturelle » de la population des niveaux pièges dans le TLD entre la fin des mesures et l'interrogation dans le four. Durant le déroulement des mesures, ces deux quantités ont été estimées et il a été montré qu'elles étaient négligeables dans les conditions expérimentales du programme PERLE.

Cette méthode présuppose implicitement que la réponse des TLD ne dépend pas de la nature du rayonnement photonique. Un TLD soumis à deux spectres de flux photoniques différents d'un point de vue énergétique mais déposant la même dose fourniront la même réponse après interrogation. Cette propriété est vérifiée pour les énergies photoniques usuelles rencontrées dans un réacteur.

#### VI.3.ii.d Limitation des mesures par TLD en fonction de la dose absorbée

Dans le paragraphe précédent, nous avons supposé que la réponse des TLD variait linéairement en fonction de la dose absorbée. Cette propriété n'est pas systématiquement vérifiée. En réalité, le comportement des TLD en fonction de la dose absorbée peut être divisé en 4 zones distinctes dont 1 seule correspond à un comportement linéaire. Pour les faibles doses, le bruit de fond n'est plus négligeable. Dans l'expérience PERLE, le bruit de fond représentait moins de 0.1% du signal utile. Ensuite, jusqu'à une dose absorbée de plusieurs dizaines de Gy, le remplissage des pièges électroniques et par conséquent la réponse du TLD varient linéairement avec la dose absorbée. Au-delà de la zone linéaire, une zone supra-linéaire apparaît. La sensibilité du TLD croît alors avec la dose absorbée. Le terme correctif permettant d'interpréter la réponse des TLD dans cette zone est complexe à estimer et génère de fortes incertitudes. Par conséquent, les TLD ne sont en général pas utilisés dans cette zone. Au-delà de la zone de supra-linéarité, la zone de saturation apparaît. Les pièges électroniques sont saturés en électrons et par conséquent, la sensibilité du TLD s'annule. Pour de telles doses, la structure cristalline des TLD subit des dommages très importants.

Pour les TLD de types FLi, la zone de linéarité s'arrête à environ 5 Gy et la saturation commence à 1000 Gy. Pour les TLD de type CaF<sub>2</sub>, la zone de linéarité s'arrête à 100 Gy. Ces valeurs sont tirées de la référence[84]. Durant le programme expérimental PERLE, Les doses maximales mesurées étaient de l'ordre de 1 Gy. Par conséquent, l'expression de la dose déposée en fonction de la réponse proposée dans le paragraphe précédent était légitime.

### **VI.4 Interprétation des mesures par TLD dans PERLE**

Le but des mesures par TLD est d'estimer l'échauffement  $\gamma$  dans le matériau environnant. Par conséquent, la dose déposée dans le TLD, que l'on obtient après leurs interrogations, n'est pas la réponse utile. Le facteur de correction de cavité permet de passer de l'un à l'autre.

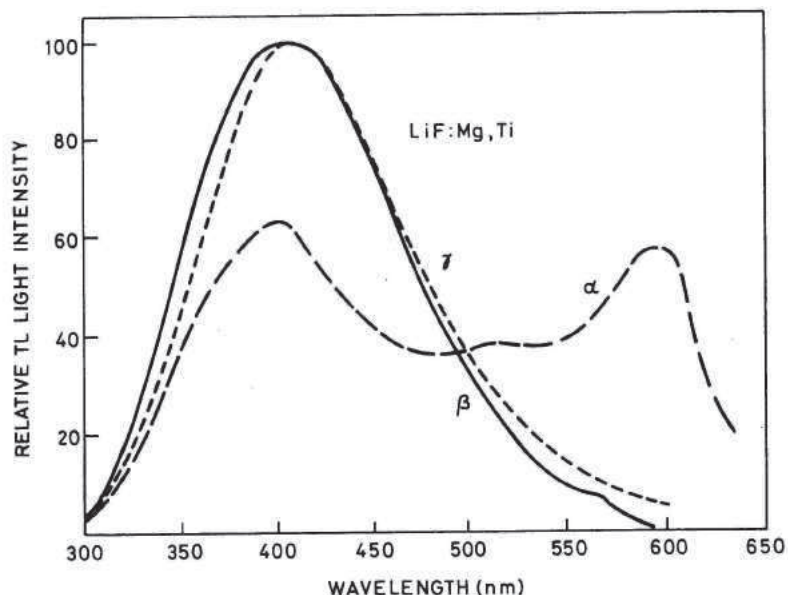
Avant d'estimer ce facteur, il est également nécessaire de prendre en compte ce que l'on appelle la problématique des champs mixtes.

#### **VI.4.i La problématique de l'irradiation des TLD en champ mixte neutron-photon**

Dans un réacteur, les TLD sont en présence d'un champ mixte de neutrons et de photons. Chacune de ces particules dépose une partie de son énergie sous forme de dose dans les TLD. Par conséquent, après interrogation, la réponse d'un TLD contient deux composantes, que l'on considère comme indépendantes, et qui correspondent à la réponse photon et la réponse neutron. Pour estimer l'échauffement photonique, il convient donc de supprimer la composante neutronique de la réponse des TLD.

Les TLD n'ont pas la même sensibilité aux doses photoniques et neutroniques. En effet, la dose photonique est principalement déposée par les électrons libérés lors des interactions photo-atomiques tandis que la dose neutronique est principalement déposée par des ions (noyau de recul, particule  $\alpha$ , protons, ...). Les processus de transfert d'énergie entre les électrons et la matière et entre les ions et la matière ne sont pas les mêmes. Par conséquent, à énergies cinétiques égales, le nombre d'électrons piégés suite à l'interaction d'un électron sera différent de celui du à l'interaction d'un ion. De plus, il apparaît même que les énergies des pièges diffèrent en fonction du rayonnement. Ce phénomène est particulièrement visible sur la Figure VI-9 sur laquelle sont tracés les spectres d'émission des pics de thermoluminescence du FLi. Cette figure est tirée de la référence [85]. Nous pouvons voir les spectres d'émissions de photons de thermo-luminescence suite à une irradiation photonique ou électronique sont semblables. Le même spectre d'émission à la suite d'une irradiation de particule  $\alpha$  est quant à lui très différent. Un pic de thermoluminescence est observé autour d'une longueur d'onde de 600 nm qui n'est pas observé dans les deux autres spectres.

**Figure VI-9 Spectre d'émission des principaux pics de thermoluminescence du matériau LiF : Mg, Ti après exposition à différents types de radiations**



Pour estimer la sensibilité de la réponse des TLD aux photons, nous avons vu que nous passions par une phase de calibration basée sur le fait que la réponse des TLD ne dépendait pas de l'énergie du photon. Il n'est pas possible d'effectuer la même chose pour les neutrons. En effet, de par la nature résonante des sections efficaces favorisant parfois la diffusion, parfois la capture radiative, il n'est pas possible de considérer la réponse des TLD comme indépendante de l'énergie du neutron et uniquement dépendant de la dose neutron.

La littérature fournit les coefficients de sensibilités neutroniques. Ceux-ci sont en général entachés d'une incertitude très élevée (parfois de l'ordre de 100%). Ces sensibilités sont dépendantes de l'énergie du neutron.

#### **VI.4.ii La problématique de la correction de cavité**

Une fois la composante neutronique supprimée de la réponse du TLD, celle-ci ne contient plus que la dose photonique. Il convient donc de calculer le coefficient de cavité qui permettra de passer de cette dose déposée dans le TLD à la dose déposée dans le matériau. Ainsi, en notant  $D_m$  et  $D_c$  les doses déposées dans le matériau et dans la cavité (le TLD), le facteur de correction de cavité peut s'exprimer ainsi :

$$D_m = \frac{1}{f} D_c$$

Plusieurs modèles ont été postulés afin d'estimer ce facteur en fonction de l'énergie photonique ainsi que de la taille et de la nature de la cavité.

#### VI.4.ii.a Modèle de petite cavité de Bragg-Gray

Le modèle de Bragg-Gray permet d'estimer ce facteur lorsque la taille de la cavité est petite vis-à-vis du parcours des électrons. Dans ce cas, le flux d'électron dans le TLD est considéré comme non perturbé. Il est donc semblable à celui qui serait observé si la cavité était remplacée par le matériau environnant. Les interactions photoniques dans le TLD doivent également être négligeables afin que seuls les électrons provenant de l'extérieur de la cavité déposent leurs énergies dans la cavité. Si ces deux conditions sont réunies, alors l'expression du facteur de correction de cavité prend pour expression :

$$\frac{D_m}{D_c} = \frac{\int_0^{E_{\max}} \Phi_e(E) \cdot \left( \frac{S}{\rho} \right)_{coll,m} dE}{\int_0^{E_{\max}} \Phi_e(E) \cdot \left( \frac{S}{\rho} \right)_{coll,c} dE}$$

Avec  $\phi_e$ , le flux d'électron primaire généré dans le milieu environnant et  $S/\rho$  le pouvoir d'arrêt électronique massique défini dans le chapitre 3.

#### VI.4.ii.b Modèle des cavités mixtes de BURLIN

La cavité de Bragg-Gray est un modèle idéal vers lequel on cherche à faire tendre les instruments de mesure d'échauffement  $\gamma$ .

En réalité, la dose déposée dans une cavité contient deux composantes :

- La première composante est constituée des électrons générés dans la cavité qui y déposent leurs énergies.
- La seconde composante est constituée des électrons générés hors de la cavité qui entrent dans celle-ci pour y déposer une partie de leurs énergies.

Le modèle de Bragg-Gray ne considère que la première composante est toujours négligeable. Cela dépend en fait de l'énergie des photons pénétrant dans la cavité. Pour les photons de haute énergie, les électrons générés ont une portée qui est grande devant les dimensions de la cavité. Le flux électronique n'est donc pas perturbé par la cavité qui vérifie donc l'une des conditions de Bragg-Gray. Pour les photons de plus basses énergies, la portée des électrons devient du même ordre de grandeur voir plus petite que les dimensions de la cavité. La majorité des électrons déposés dans la cavité sont alors générés dans celle-ci. Le facteur de correction de cavité à ces énergies est alors indépendant du transport électronique et devient :

$$f(E_\gamma) = \frac{\left( \frac{\mu_{en}}{\rho} \right)_C (E_\gamma)}{\left( \frac{\mu_{en}}{\rho} \right)_M (E_\gamma)}$$

La cavité est alors qualifiée de grande cavité.

Il existe des modèles théoriques tels que le modèle de Burlin qui permettent de prédire le facteur de correction de cavité en fonction de l'énergie des photons incidents. Ce modèle suppose que les cavités ont à la fois un comportement de petite et de grande cavité. L'importance de chacun de ces comportements dépend de l'énergie du photon incident et de la géométrie de la cavité. Ainsi, dans le modèle de Burlin le coefficient de cavité peut s'exprimer ainsi :

$$f(E_\gamma) = d(E_\gamma, \text{cavité}) f_{BG}(E_\gamma) + (1 - d(E_\gamma, \text{cavité})) f_{GC}(E_\gamma)$$

$f_{BG}$  et  $f_{GC}$  sont les facteurs de corrections de cavité de Bragg-Gray et de grande cavité.  $d$  est un facteur de pondération dépendant de l'énergie du photon incident et de dimensions de la cavité. Ce facteur s'approche de 1 à mesure que les dimensions de la cavité diminuent et que l'énergie des photons augmente.

#### VI.4.ii.c Calcul des coefficients de cavité dans le cadre de l'expérience PERLE

Dans les deux modèles de cavités définis précédemment, nous avons considéré que le problème était localement constitué de deux matériaux : la cavité et le matériau environnant. Dans le cas de l'expérience PERLE, la géométrie est plus complexe. L'environnement des TLD est constitué d'air, des autres TLD, de l'acier des piluliers et enfin de l'acier du réflecteur qui est le matériau environnant dans lequel nous souhaitons estimer l'échauffement. Cet environnement est beaucoup trop complexe pour que le facteur de cavité soit estimé avec le modèle de cavité de Burlin.

Pour estimer ce facteur, nous utiliserons donc le code Monte Carlo TRIPOLI4. Dans un premier calcul, nous estimerons la dose déposée dans le TLD. Dans un second calcul nous estimerons la dose déposée dans le matériau environnant sans simuler le système de mesure. Le rapport de ces deux doses est le coefficient de cavité.

En appliquant ensuite ce facteur aux mesures d'échauffements  $\gamma$ , nous pourrions en déduire les échauffements dans l'acier du réflecteur.



## **Chapitre VII Qualification du code TRIPOLI4 par interprétation des mesures PERLE**

Le programme expérimental PERLE s'inscrit dans le cadre d'un besoin de qualification des codes de transport de particules pour le calcul des échauffements photoniques. Le but de cette partie est d'apporter les éléments permettant de qualifier le code TRIPOLI4 ainsi que la bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1 en interprétant les mesures d'échauffement  $\gamma$  du programme expérimental PERLE. Ce chapitre est tiré de la référence [87].

### **VII.1 Méthodologie d'interprétation des mesures par TLD**

Après irradiation dans le cœur PERLE, la réponse des TLD contient trois composantes :

- Une composante due à la dose  $\gamma$  prompt,
- Une composante due à la dose  $\gamma$  retardé,
- Une composante due à la dose neutron.

L'interprétation des mesures passe donc par l'estimation de chacune de ces composantes. Pour cela, nous utiliserons le code de transport de particule TRIPOLI4.8 associé à la bibliothèque d'application CEA v5 qui est constituée dans sa majeure partie des évaluations JEFF-3.1.1.

#### **VII.1.i Le calcul de la composante prompte**

Les TLD sont des objets dont la taille est du même ordre de grandeur, voir plus petite que le libre parcours moyen des électrons<sup>40</sup> l'environnant. Par conséquent, l'équilibre électronique n'est pas vérifié et la dose déposée par les photons est différente du KERMA. Le transport des électrons doit impérativement être simulé dans les calculs pour estimer correctement la dose déposée dans le TLD.

Ainsi, pour l'interprétation des mesures PERLE, le calcul idéal, c'est-à-dire faisant appel au minimum d'approximation, consiste à simuler simultanément les neutrons, les photons, les électrons et les positons dans tout le cœur PERLE représenté le plus finement possible et d'en déduire l'énergie déposée par les électrons et positons dans les TLD. En réalité, ce calcul n'est pas réalisable. En effet, le transport des électrons augmente énormément le temps de calcul entre deux histoires neutroniques. Il est très difficile de calculer l'énergie déposée dans les TLD avec une bonne précision dans un temps raisonnable.

Heureusement, d'autres méthodes de calcul ont donc été envisagées. Grâce à certaines approximations ou à certaines méthodes de biaisage le temps calcul est réduit sans pour autant détériorer la réponse.

##### **VII.1.i.a Le calcul couplé neutron-photon-électron local**

Le principal frein à la convergence du calcul est lié au transport des électrons. Celui-ci prend beaucoup trop de temps malgré les simplifications faites par TRIPOLI4 telles que le formalisme de diffusion multiple. Pour diminuer ce temps de calcul, il convient donc de diminuer au maximum le nombre d'électrons simulés.

---

<sup>40</sup> Quelques mm dans l'acier

En utilisant la formule de Katz et Penfold[86] nous avons estimé la portée des électrons dans l'acier en fonction de leurs énergies :

$$P_{g.cm^{-2}} = 0.412 \cdot E^{1.265-0.0954 \cdot \ln(E)}$$

Pour un électron de 3 MeV, la portée n'est que de 1.9 mm dans l'acier et de 1.446 mm dans le combustible. Cette valeur avoisine le micromètre pour des électrons de 25 keV quel que soit le matériau considéré.

Ainsi, dans les intervalles d'énergies propres aux réacteurs nucléaires, la portée des électrons n'est au maximum que de quelques millimètres. Nous pouvons en déduire qu'aucun des électrons générés à plus d'1 cm d'un TLD ne déposera son énergie dans un TLD. Par conséquent, tous les électrons générés « loin » des TLD ne sont pas utiles pour le calcul d'énergie déposée. Il n'est donc pas nécessaire de les simuler. Dans la géométrie PERLE symétrisée, contenant les 7 TLD dans le réflecteur, le volume « utile » dans lequel les électrons doivent être transportés représente environ 100 cm<sup>3</sup> que l'on peut comparer au volume total du cœur PERLE qui est de l'ordre de 1 m<sup>3</sup>. Il y a donc 4 ordres de grandeurs de différence entre les deux. Il est donc particulièrement intéressant de pouvoir restreindre le volume de simulation des électrons.

Nous constatons également que pour les faibles énergies, la portée des électrons est très faible en comparaison de la taille des TLD. Cela signifie qu'un électron de 25 keV émis dans un TLD a une probabilité quasi nulle d'en sortir pour aller déposer son énergie ailleurs. De même, un électron généré dans l'acier autour des TLD ne se déplacera presque jamais jusqu'au TLD. Nous pouvons donc considérer qu'en dessous de 25 keV, les électrons ne se transportent pas et la dose  $\gamma$  est équivalente au KERMA  $\gamma$ .

Dans le code TRIPOLI4.8, l'option VOLENERCUT permet d'imposer des seuils de coupure bas en énergie en fonction du volume considéré. Ainsi, pour simuler localement les électrons autour des détecteurs, il suffit de définir un volume englobant les piluliers dans lequel le seuil de coupure bas des électrons se situe à 25 keV. Dans tout le reste du cœur, nous imposons un seuil de coupure à 30 MeV. Dans les bibliothèques, nous n'avons trouvé aucune évaluation pouvant émettre un photon d'énergie supérieure à 30 MeV. Hors des volumes englobant, aucun électron n'est donc simulé.

La diminution du volume simulant les électrons permet de diminuer le temps de calcul entre deux histoires. Cependant, la convergence du calcul de la dose déposée diminue faiblement d'une histoire à l'autre à cause du faible volume occupé par les TLD. En effet, le principe d'un calcul Monte Carlo d'une quantité dans un volume donné est basé sur le comptage d'événements particuliers ayant lieu dans ce volume. Un volume petit verra un moins grand nombre d'évènement par histoire. La convergence sur le calcul variera donc plus lentement avec le nombre d'histoires.

Dans la zone fissile, le nombre de photons pénétrant dans les piluliers et les TLD est très important. La dose déposée calculée converge avec une incertitude de 1 à 2% (1 $\sigma$ ). Dans le réflecteur, le flux photonique est beaucoup moins important. La convergence peut alors atteindre 6 à 7% (1 $\sigma$ ) dans les TLD situés les plus loin de la zone fissile. De plus, le calcul nécessaire pour obtenir cette précision est très lourd. Il nécessite l'utilisation de 512 processeurs d'environ 2 GHz durant 24h afin de simuler 16 milliards de neutrons et environ 4 fois plus de photons et d'électrons.

Ainsi, nous arrivons aux limites de la méthode du calcul en 1 étape. Il est nécessaire d'envisager d'autres méthodes de calculs pour améliorer la convergence.

### VII.1.i.b Le calcul en deux étapes avec stockage des particules

Dans le code TRIPOLI4.8, l'énergie déposée est calculée avec un estimateur de type collision. Ainsi, dans un calcul couplé neutron-photon, pour chaque histoire simulée, l'énergie déposée par les photons n'est calculée que si l'un d'eux a interagi (est entré en collision) avec l'un des atomes situés à l'intérieur d'un TLD. Tous les autres photons ayant traversé le TLD sans y interagir n'ont pas été comptabilisés. S'ils n'avaient pas été simulés, le résultat du calcul n'aurait pas été différent. Dans un calcul couplé neutron-photon-électron, le principe est le même. Pour qu'un électron puisse déposer son énergie dans le TLD, il faut avant tout qu'il ait été généré lors d'une interaction photo-atomique. Dans les deux calculs sans et avec simulation des électrons, la dose déposée est estimée à travers les collisions photoniques.

A l'aide du code XCOM[88], nous avons calculé les libres parcours moyens des photons dans les différents matériaux du cœur. Ainsi, nous pourrions estimer leurs fréquences d'interaction. Les résultats se trouvent dans le Tableau VII-1. Dans l'ensemble du cœur PERLE l'énergie des photons varie entre 0 et environ 10 MeV avec une moyenne située entre 1 et 2 MeV.

**Tableau VII-1 Libre parcours moyen des photons pour différentes énergies dans différents matériaux du cœur PERLE**

	Libre parcours moyen [cm]				
	0.1 MeV	0.5 MeV	1 MeV	2 MeV	3 MeV
CaF2	1.06	2.48	3.41	4.82	5.82
FLi	2.18	3.76	5.13	7.34	9.11
Acier	0.38	1.56	2.15	2.97	3.50
UOx	0.07	0.58	1.35	2.16	2.39

**Le libre parcours moyen des photons est très grand vis-à-vis des dimensions des TLD. Par conséquent, les photons  $\gamma$  y interagissent très peu et statistiquement y déposent donc très rarement leurs énergies. C'est pourquoi le calcul de l'énergie déposée dans les TLD converge si mal. Dans le**

Tableau VII-2, nous avons calculé les probabilités d'interaction des photons en fonction de la distance parcourue dans le TLD :

$$P = 1 - \exp\left(-\frac{e}{L}\right)$$

$e$  est l'épaisseur traversée et  $L$  le libre parcours moyen. Les parcours maximum et minimum correspondent aux cordes les plus longues et les plus courtes traversant les TLD.

**Tableau VII-2 Probabilité d'interaction des photons dans les TLD en fonction de leurs parcours**

Parcours	Probabilité d'interaction [%]		
	0.1 MeV	0.5 MeV	1 MeV
CaF2 épais			
Minimum	8.1	3.6	2.6
Maximum	26.1	12.1	9.0
CaF2 fin			
Minimum	3.5	1.5	1.1
Maximum	26.1	12.1	9.0
FLi			
Minimum	3.6	2.1	1.5
Maximum	18.7	11.3	8.4

Ainsi, un photon traversant les volumes utiles pour le calcul de la dose déposée dans le TLD ont très peu de chance d'y interagir.

Le flux photonique, qui peut permettre de calculer le KERMA photon par l'intermédiaire des facteurs de KERMA, est estimé avec un autre estimateur : l'estimateur corde. Durant chaque histoire, tous les photons traversant le volume de calcul sont comptabilisés. Ils sont pondérés par un facteur qui dépend de la longueur de la corde empruntée. Avec cet estimateur, le calcul du flux de photon dans les TLD converge avec une incertitude maximale de l'ordre de 2% dans les TLD CaF2 fins situés les plus loin de la zone fissile. On peut donc en déduire que le nombre de photons traversant les TLD est connu avec une meilleure précision que le nombre de photons interagissant dans le TLD. Par conséquent, si nous stockons les photons ayant traversé le TLD et que nous les simulons ensuite un très grand nombre fois, nous pourrions améliorer la convergence de la dose déposée tout en conservant le flux photonique.

Il est possible de stocker tous les photons ayant traversé le TLD. En considérant un volume fictif entourant les TLD<sup>41</sup>, les photons ayant été comptabilisés dans le calcul du flux peuvent être divisés en deux catégories : ceux qui ont traversé la surface du volume englobant et les autres. Ainsi, en stockant les caractéristiques de tous les photons traversant la surface du volume englobant, et de tous les photons ayant été générés à l'intérieur du

---

<sup>41</sup> Nous prenons un volume plus important que le TLD car la dose dépend du transport des électrons situés à l'extérieur du TLD

volume englobant, nous sommes certains de prendre en compte tous les photons ayant été comptabilisés dans le calcul du flux. Les photons ayant traversé plusieurs fois la surface à cause des diffusions sont bien évidemment stockés plusieurs fois avec des caractéristiques différentes.

Il est possible de mettre en pratique cette méthode avec le code TRIPOLI4 en effectuant un calcul en deux étapes :

- La première étape est un calcul couplé neutron-photon sans simulation des électrons. Nous définissons un volume fictif contenant les TLD, les piluliers et une partie de l'acier du réflecteur. Grâce à l'option « STOCKAGE » des particules de TRIPOLI4.8, nous enregistrons dans des fichiers externes au format ASCII tous les photons entrant dans ce volume. Les photons sont stockés selon 8 paramètres : 3 paramètres de position, 3 paramètres de direction, l'énergie et le poids. Nous calculons également les sources de photon à l'intérieur de ce volume en utilisant la sortie « PRODUCTION PHOTON » que nous avons utilisée dans le chapitre 5. Celles-ci sont presque uniquement générées par la capture radiative de l'acier et des piluliers.
- La seconde étape est un calcul couplé photon-électron. Les courants photoniques stockés ainsi que les sources calculées dans la première étape sont simulés un grand nombre de fois. Ainsi, chacun de ces photons, qui n'avaient participé qu'à une seule histoire lors de la première étape, est dupliqué plusieurs centaines de fois. Le nombre d'histoires durant lesquelles une interaction a lieu dans ou autour d'un TLD augmente la convergence statistique. En principe, l'incertitude sur la dose déposée doit donc diminuer. Il est important lors de cette étape de ne simuler que le volume englobant et de remplacer le reste de la géométrie par du vide. En effet, les photons réfléchis ayant déjà été pris en compte lors du stockage du courant, aucun photon ne sortant du volume englobant ne doit être réfléchi.

Cette méthode est explicitée sur les Figure VII-1 et Figure VII-2. Un travail a été réalisé montrant la faisabilité de cette méthode dans la référence [89].

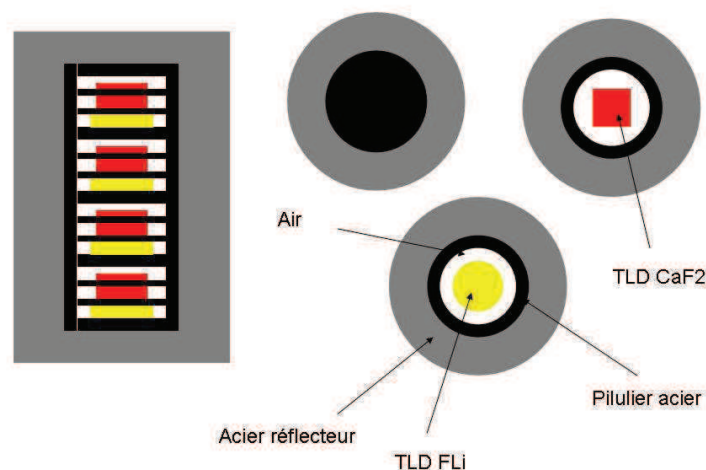
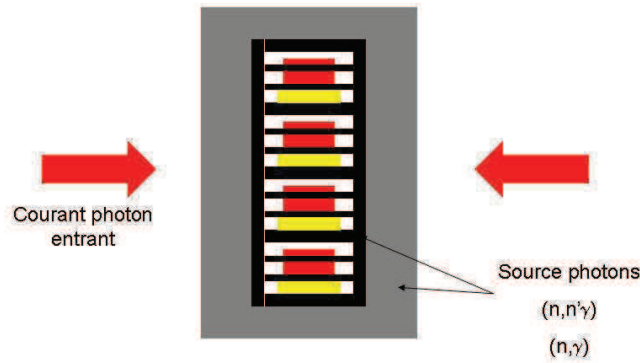


Figure VII-1 Description du volume englobant les piluliers



**Figure VII-2 Stockage du courant entrant et des sources photons**

#### VII.1.i.c Le calcul en deux étapes avec géométrie simplifiée

Cette méthode de calcul est basée sur la supposition qu'il existe un facteur de dose par équivalence avec le facteur de KERMA. C'est-à-dire que la dose peut se déduire d'une intégration simple du flux photonique pondéré par un facteur de dose.

La dose déposée dans le TLD dépend des sources d'électrons primaires (créées lors des interactions photo-atomiques) et secondaires (créées lors des interactions électron-électron) générées dans et autour du TLD ainsi que de leurs transports vers le TLD. La source primaire en un point  $\mathbf{r}$  ne dépend que des taux de réaction photoniques au même point  $\mathbf{r}$ . La source secondaire en un point  $\mathbf{r}$  dépend des sources électroniques primaires générées en tout point et pondérées par un terme de transport. L'intensité et la forme spectrale de ces sources électroniques dépend directement des taux de réactions photo-atomiques et par conséquent du flux photonique. La dose déposée dans le TLD est déduite du transport des sources électroniques primaires et secondaires créées en tous points. Ainsi, on peut proposer une expression de la dose dans les TLD dépendante de tous ces paramètres :

$$D = \int_0^{E_{\max}} \int_V S(E_\gamma, \vec{r}) \cdot T(E_\gamma, \vec{r}) \cdot \Sigma(E_\gamma, \vec{r}) \cdot \phi(E_\gamma, \vec{r}) \cdot \vec{dr}^3 \cdot dE_\gamma$$

Avec :

- $S(E_\gamma, \mathbf{r})$  un terme caractéristique des sources électroniques générées au point de coordonnée  $\mathbf{r}$ ,
- $T(E_\gamma, \mathbf{r})$  un terme caractéristique du transport jusqu'au TLD des électrons générés au point  $\mathbf{r}$  par des photons d'énergie  $E_\gamma$ ,
- $\Sigma(E_\gamma, \mathbf{r}) \cdot \phi(E_\gamma, \mathbf{r})$  le taux de réaction photo-atomique total au point  $\mathbf{r}$ .

Nous avons vu dans le chapitre 4 qu'en négligeant le Brehmsstrahlung, seuls les électrons générés à une distance de quelques millimètres du point de mesure contribuaient à la dose déposée. Par conséquent, le volume  $V$  de l'intégrale précédente se réduit en réalité à un volume englobant les TLD et incluant quelques millimètres de l'acier environnant. Sur ce volume, le flux photonique est presque constant. L'intégrale précédente peut ainsi être réduite et prendre pour expression :

$$D = \int_0^{E_{\max}} \int_V S(E_\gamma, \vec{r}) \cdot T(E_\gamma, \vec{r}) \cdot \Sigma(E_\gamma, \vec{r}) \cdot \overrightarrow{dr}^3 \cdot \phi(E_\gamma) \cdot dE_\gamma$$

$$D = \int_0^{E_{\max}} d(E_\gamma) \cdot \phi(E_\gamma) \cdot dE_\gamma$$

Le facteur  $d(E_\gamma)$  est bien une sorte de facteur de dose, par équivalence avec le facteur de KERMA. Cependant, contrairement au facteur de KERMA, celui-ci ne peut pas être défini de manière rigoureuse car il dépend de la géométrie du problème, notamment de la nature des matériaux environnants le point de mesure.

La méthode de la géométrie simplifiée consiste à effectuer le calcul de l'énergie déposée par les électrons dans une géométrie proche de la géométrie réelle. Dans cette géométrie simplifiée, le calcul de l'énergie déposée par les électrons converge beaucoup mieux que dans la géométrie réelle. Si le flux photonique dans un volume entourant les TLD est identique, à un facteur de normalisation près que l'on note  $N$ , au flux photonique dans le même volume dans la géométrie complète. D'après l'expression de la dose que nous avons postulée précédemment, le rapport des doses dans les géométries cœur complet (CC) et simplifiée (GC) peut s'écrire :

$$\frac{D_{CC}}{D_{GS}} = \frac{\int_0^{E_{\max}} d(E_\gamma) \cdot \phi_{CC}(E_\gamma) \cdot dE_\gamma}{\int_0^{E_{\max}} d(E_\gamma) \cdot \phi_{GC}(E_\gamma) \cdot dE_\gamma} = \frac{\int_0^{E_{\max}} d(E_\gamma) \cdot \phi_{CC}(E_\gamma) \cdot dE_\gamma}{\int_0^{E_{\max}} d(E_\gamma) \cdot N \cdot \phi_{CC}(E_\gamma) \cdot dE_\gamma} = \frac{1}{N}$$

Ainsi, la quantité  $D_{CC}$  que l'on calcule mal avec la méthode en 1 étape à cause d'une convergence difficile peut être estimée à partir des quantités  $D_{GS}$  et  $N$  qui sont obtenues avec une très bonne convergence (<1%).

### VII.1.ii Le calcul de la composante retardée

Les photons  $\gamma$  prompts sont les contributeurs majoritaires à la dose photon déposée dans un réacteur nucléaire. Cependant, il est indispensable de bien prendre en compte la composante retardée de la dose photon qui à l'équilibre peut représenter plus de 30% de la dose totale dans le combustible.

Nous souhaitons estimer la contribution des produits d'activation à la dose retardée. Pour cela, nous listons dans le Tableau VII-3 les périodes radioactives et les énergies dégagées par les principaux produits d'activation. Nous pouvons constater que les périodes de ces noyaux sont très longues vis-à-vis de la durée des montées en puissance lors des divergences du cœur PERLE qui pour rappel était de 10 minutes pendant les mesures par TLD. Nous avons placé l' $^{239}\text{U}$  et le  $^{239}\text{Np}$  dans la même case car ils font partie de la même chaîne de radioactivité (le  $^{239}\text{Np}$  est le noyau fils obtenu lors de la désintégration de l' $^{239}\text{U}$ ).

**Tableau VII-3 Production photonique des principaux produits d'activation**

Noyaux	Période radioactive	Energie $\gamma$ retardée [keV]
$^{239}\text{U}$ , $^{239}\text{Np}$	23.5 min, 2.4 jours	52, 182
$^{51}\text{Cr}$	27.7 jours	33
$^{59}\text{Ni}$	7.6 ans	2.5
$^{60}\text{Co}$	5.2 ans	2500
$^3\text{T}$	12.3 ans	0

D'après ces données, la contribution des produits d'activation à la dose retardée est négligeable. Par conséquent, les désintégrations radioactives des produits de fission sont les



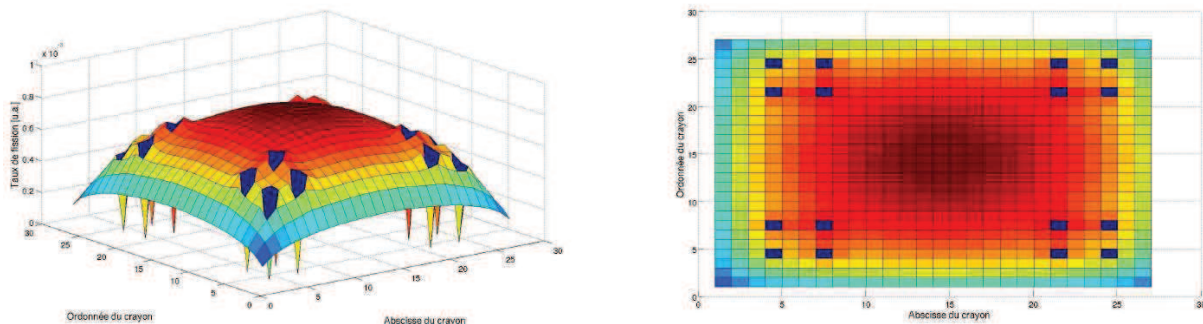
seuls contributeurs à la dose retardée dans le cadre de l'expérience PERLE. Le calcul de cette dose retardée s'effectue en trois étapes :

- Calcul des taux de fission dans chaque crayon combustible via un calcul TRIPOLI4 ne transportant que des neutrons,
- Calcul du spectre de  $\gamma$  retardé moyen émis par fission durant la totalité de l'irradiation à l'aide du code PEPIN2,
- Calcul de la dose déposée dans les TLD via un calcul couplé TRIPOLI4 transportant les photons, les électrons et les positons dans lequel nous simulons les sources calculées dans les deux premières étapes intensité et spectre.

Pour simplifier les calculs, nous avons considéré que la fission de tous les actinides quelle que soit l'énergie du neutron incident conduit au même spectre retardé. Celui-ci est le spectre associé à la fission thermique de l' $^{235}\text{U}$ . Ainsi, nous n'avons calculé qu'un seul spectre  $\gamma$  moyen. En calculant les taux de fission de l' $^{235}\text{U}$  et de l' $^{238}\text{U}$  pondérés par les énergies retardées contenues dans les évaluations, nous avons déduit que le biais introduit par cette approximation est inférieur à 0.2% sur l'énergie  $\gamma$  retardée totale émise dans le cœur.

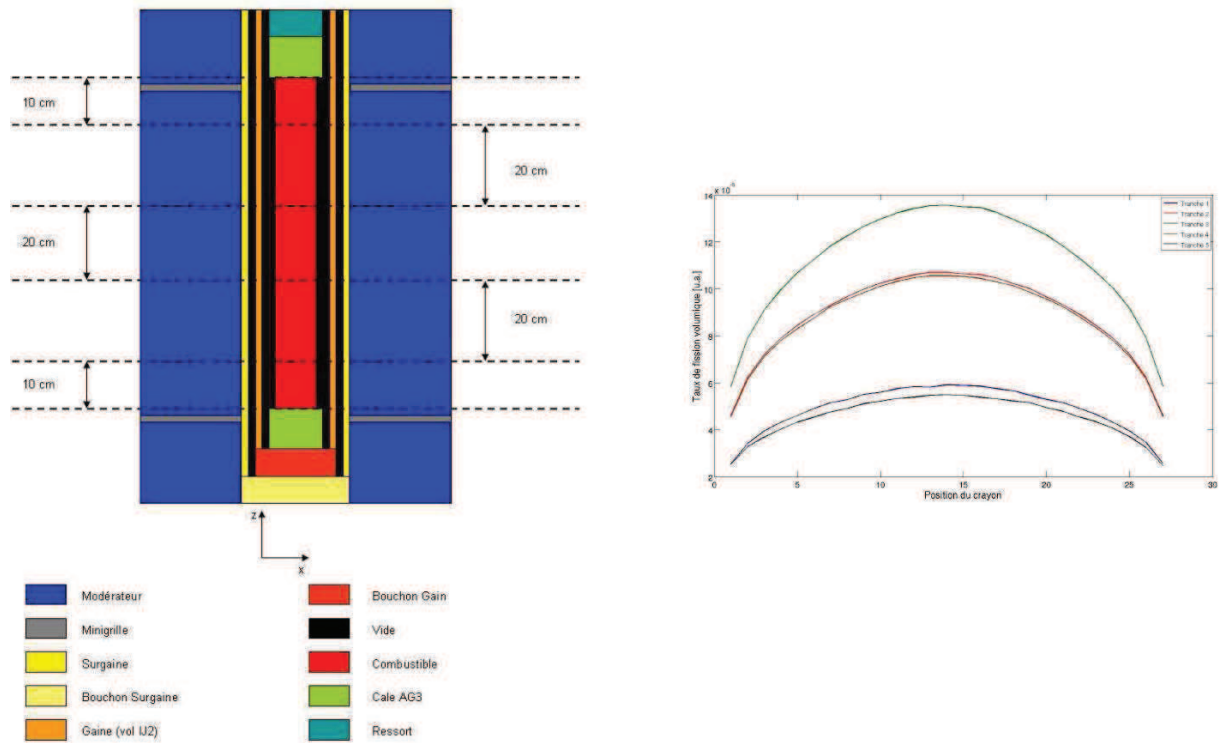
#### VII.1.ii.a Précisions sur le calcul des taux de fission

Les taux de fission ont été calculés dans chaque crayon. Les résultats sont affichés sur la Figure VII-3 où les abscisses et les ordonnées sont les coordonnées des crayons combustibles dans le réseau. Les 16 points pour lesquels le taux de fission est nul correspondent aux coordonnées des barres de sécurité.



**Figure VII-3 Distribution des taux de fission dans le réseau de crayon combustible**

Afin de prendre en compte les effets liés à la forme sinusoïdale de la distribution axiale de puissance, nous avons découpé la partie combustible de tous les crayons en 5 volumes distincts. En tout, les taux de fission ont donc été calculés dans 3565 volumes différents. Sur la Figure VII-4, nous avons tracé les taux de fission volumiques pour les crayons situés sur l'une des traverses centrales du réseau de crayon dans chacun des cinq volumes de découpage du combustible. Le taux de fission du crayon central est environ 3 fois plus élevé qu'en périphérie, ce qui confirme la nécessité de ce découpage. Les facteurs de forme axial et radial obtenus avec ce calcul valent respectivement 1.34 et 1.45.



**Figure VII-4 Traverse radiale de taux de fission dans les différentes tranches axiales du combustible**

#### VII.1.ii.b Le calcul du spectre $\gamma$ retardé intégré

Dans le chapitre 4, nous avons vu que la fission thermique de  $^{235}\text{U}$  conduit à la formation de 977 produits de fission différents. Ceux-ci peuvent être très légers comme l'hydrogène, l'hélium et le bore<sup>42</sup> ou lourds tels que le gadolinium ou le néodyme. La plupart de ces noyaux sont radioactifs et sont parfois très éloignés de la vallée de la stabilité. Par exemple, pour le  $^{161}\text{Nd}$ , 6 désintégrations  $\beta$  successives sont ainsi nécessaires avant d'atteindre un noyau stable.

A chacun de ces noyaux est attribué un rendement indépendant de fission noté  $Y_f^i(X^A X)$  qui est tabulé dans la bibliothèque de donnée nucléaire JEFF-3.1.1. Ce rendement est nul pour les noyaux qui sont créés uniquement via la désintégration d'un autre produit de fission (et non pas directement après une fission). Grâce à ces données, nous connaissons statistiquement la concentration isotopique moyenne juste après la fission (c'est-à-dire environ  $10^{-9}$  s après la scission du noyau). Il suffit ensuite de résoudre les équations de Bateman afin de suivre l'évolution de ce système tout en calculant le spectre  $\gamma$  émis en continu par les désintégrations radioactives. L'équation de Bateman associée au produit de fission  $X_i$  peut s'écrire ainsi :

$$\begin{cases} \frac{dN_i}{dt} = \sum_p \lambda_p N_{p,i} - \lambda_i N_i \\ N_i(t=0) = Y_f^i(X_i) \end{cases}$$

Avec :

- $N_i$  est la concentration du produit de fission  $X_i$ .

<sup>42</sup> Ce sont les isotopes produits lors de la fission ternaire

- $\lambda_i$  est la constante radioactive du produit de fission  $X_i$ .
- $N_{p,i}$  est l'un des noyaux pères du produit de fission  $X_i$ .

Dans ces équations, nous avons volontairement omis les termes de disparition par capture neutronique. Dans le cas de l'expérience PERLE, les flux neutroniques sont très faibles. Les termes de capture dans l'équation de Bateman sont donc négligeables. Ce n'est pas le cas dans les réacteurs de puissance où la concentration de certains noyaux tels que le  $^{135}\text{Xe}$  dépend très fortement de sa capture neutronique et par conséquent du flux neutronique.

Une fois toutes les équations associées à tous les produits de fission résolues, le spectre d'émission  $\gamma$  en fonction du temps se déduit de l'activité de chaque produit de fission :

$$S_{\gamma, \text{tot}}(E_{\gamma}, t) = \sum_i \lambda_i \cdot N_i(t) \cdot S_{\gamma, i}(E_{\gamma}) = \sum_i A_i(t) \cdot S_{\gamma, i}(E_{\gamma})$$

Avec :

- $S_{\gamma, i}$  est le spectre  $\gamma$  émis lors de la désintégration du noyau radioactif  $X_i$ .

Le code déterministe PEPIN2, qui fait partie du formulaire DARWIN a permis de résoudre numériquement ce système d'équations sur un pas de temps de 1s entre 0 et 1000s après la fission. Les spectres d'émission  $\gamma$  à chaque pas de temps ont été récupérés sur un maillage énergétique à 94 groupes qui est le même que celui utilisé lors de la représentation des nouvelles évaluations dans le chapitre 5. Les spectres d'émission  $\gamma$  en énergie par maille à 0s, 10s, 100s et 600s après la fission ainsi que l'énergie  $\gamma$  cumulée sont représentés sur les Figure VII-5 et Figure VII-6.

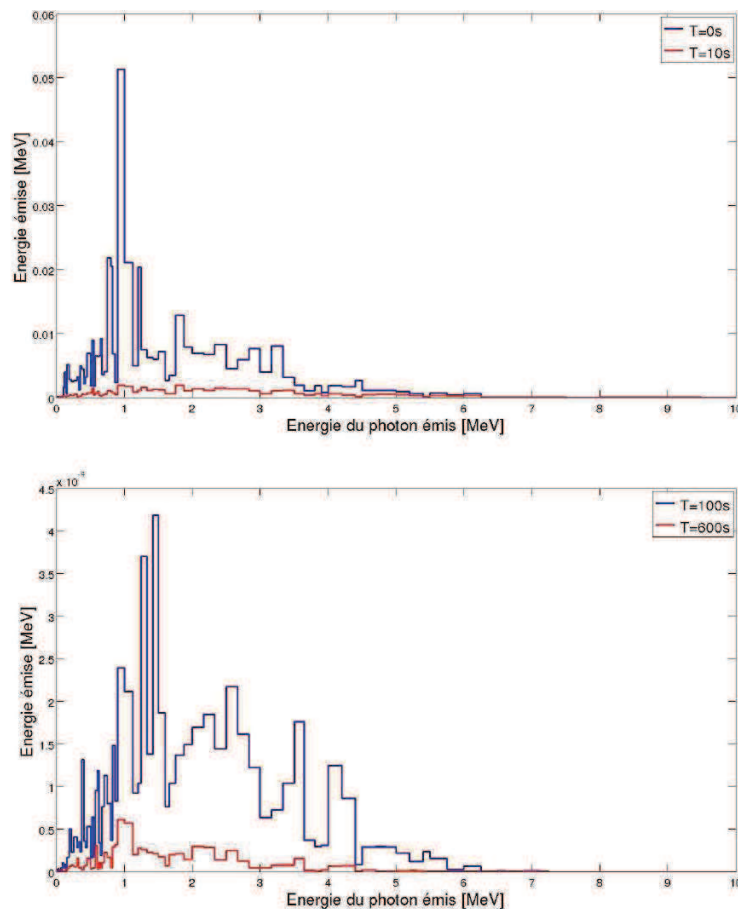
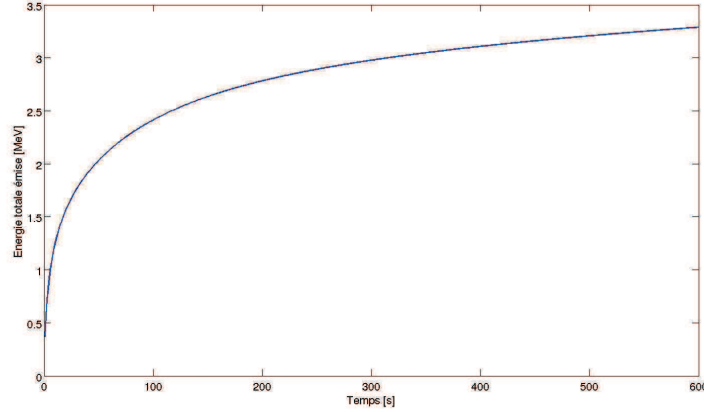


Figure VII-5 Evolution du spectre d'émission des  $\gamma$  retardés après une fission



**Figure VII-6 Energie cumulée émise par les produits de fission en fonction du temps après une fission**

10 minutes après une fission, l'énergie totale émise par les  $\gamma$  retardés est de 3.29 MeV avec la bibliothèque JEFF-3.1.1. Ainsi, sur la durée de l'expérience PERLE, l'énergie dissipée par les  $\gamma$  retardés de fission est très inférieure à celle dissipée par fission dans les conditions de fonctionnement d'un réacteur nucléaire (de l'ordre de 6 MeV).

Pour la troisième étape du calcul dans laquelle nous simulons les sources  $\gamma$ , nous ne pouvons pas effectuer un calcul TRIPOLI pour chaque pas de temps. Nous calculons donc le spectre moyen intégré sur la durée de l'expérience. Son expression est :

$$\overline{S}_{\gamma}(E_{\gamma}) = \frac{\int_0^{T_{cri}} \int_T^{T_{cri}+T_{ref}} S_{\gamma}(E_{\gamma}, T_{cri}-t) dt dT}{T_{cri} + T_{ref}}$$

Avec :

- $T_{cri}$  est la durée du palier de puissance lorsque le réacteur est critique.
- $T_{ref}$  est la durée du refroidissement entre la fin du palier de puissance et l'extraction des appareils de mesures.
- $S_{\gamma}(E_{\gamma}, t)$  est le spectre retardé de fission émis à chaque instant avec  $t=0$  l'instant de fission.

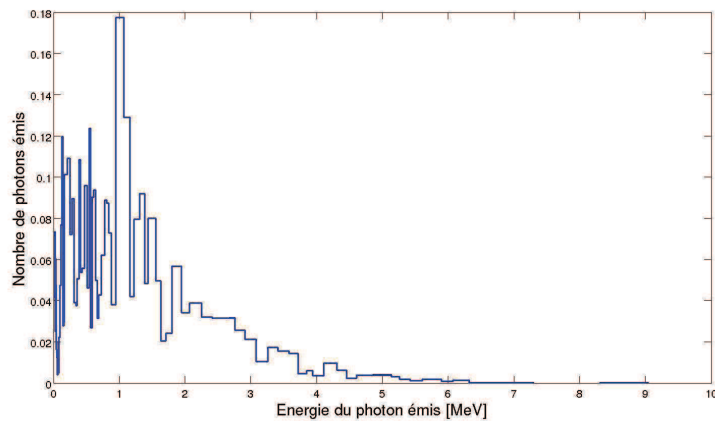
Pour mieux comprendre cette expression, nous considérons une fission à l'instant  $T$ , où  $T=0$  correspond au début des mesures. A l'instant où les TLD sont sortis du cœur, c'est-à-dire à l'instant  $T_{cri}+T_{ref}$ , le spectre total émis suite à cette fission en fonction de  $E_{\gamma}$  correspond à la seconde intégrale de l'expression précédente. La première intégrale permet de prendre en compte toutes les fissions durant la période de criticité du cœur PERLE.

En effectuant les changements de variable appropriés cette intégrale prend une expression que l'on peut facilement discrétiser :

$$\overline{S}_{\gamma}(E_{\gamma}) = \frac{\int_{T_{ref}}^{T_{cri}+T_{ref}} \int_0^T S_{\gamma}(E_{\gamma}, t) dt dT}{T_{cri} + T_{ref}} \approx \frac{\sum_{i=k}^n \Delta t \sum_{j=0}^i \Delta t \cdot S_{\gamma}(E_{\gamma}, j\Delta t)}{n\Delta t}$$

Lors de la discrétisation de l'intégrale, on observe les égalités :  $n\Delta t = T_{ref} + T_{cri}$  et  $k\Delta t = T_{ref}$ .

L'énergie totale émise par le spectre de photon retardé moyen est de 2.82 MeV. Celui-ci est représenté sur la Figure VII-7.



**Figure VII-7 Spectre moyen émis par fission par les  $\gamma$  retardés dans l'expérience PERLE**

Nous avons estimé les différentes contributions  $\gamma$  en énergie dans la partie fissile du cœur PERLE à partir d'un calcul TRIPOLI4 simulant le comportement d'un réseau infini de cellule combustible de type PERLE. Les résultats sont retranscrits dans le Tableau VII-4. La contribution des  $\gamma$  retardés est ainsi d'environ 20% de l'énergie  $\gamma$  totale émise dans le réacteur.

**Tableau VII-4 Estimation de la part de l'énergie  $\gamma$  totale émise par chaque source dans la partie combustible du cœur PERLE pour une durée d'irradiation de 10 minutes**

Composant de la zone fissile	Taux de réaction [%]	Energie $\gamma$ dégagée [MeV]	Contribution à l'énergie dégagée [%]
Gaine	0.8	8	0.9
Surgaine	0.4	8	0.4
Modérateur	9.1	1.5	1.9
Fission $^{238}\text{U}$	2.5	7.3	2.5
Capture $^{238}\text{U}$	22.9	4.8	15.0
Fission $^{235}\text{U}$	52.9	6.7	48.3
Capture $^{235}\text{U}$	11.3	6.5	10.0
$\gamma$ retardés	2.5+52.9	2.8	21.1

Nous comparons sur la Figure VII-8 les spectres retardés (fission) et prompts (fission + capture) émis par l' $^{235}\text{U}$  ainsi que le spectre de capture de l' $^{238}\text{U}$ . Ces trois spectres ont été normalisés à une fission.

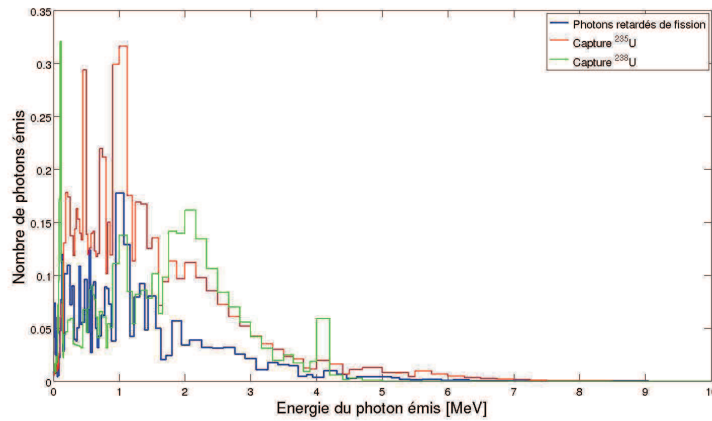


Figure VII-8 Comparaison des spectres  $\gamma$  prompts émis par l' $^{238}\text{U}$ , par l' $^{235}\text{U}$  et du spectre  $\gamma$  retardé émis par l' $^{235}\text{U}$  normalisé à une fission par seconde

### VII.1.iii Calcul de la composante neutron

Idéalement, la réponse d'un TLD sous irradiation ne devrait dépendre que de la dose photon déposée. En réalité, dans les conditions de fonctionnement d'un réacteur, les TLD sont soumis à un champ mixte composé de neutrons et de photons. La réponse du TLD intégrera donc une dose  $\gamma$  et une dose neutron. Ainsi, la réponse des TLD peut s'écrire :

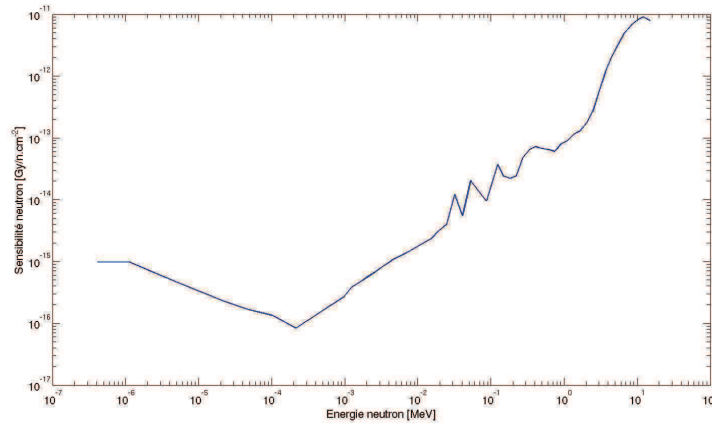
$$\begin{cases} Q = Q_\gamma + Q_n \\ Q_\gamma = \eta_\gamma D_\gamma \end{cases}$$

Avec :

- $Q_n$  et  $Q_\gamma$  sont respectivement les réponses dues aux neutrons et aux  $\gamma$ .
- $\eta_\gamma$  est l'efficacité des TLD à la dose  $\gamma$ .

L'ASTM[90] préconise de diviser la réponse neutron en deux composantes en fonction de l'énergie du neutron :

- Une composante thermique pour les neutrons d'énergie inférieure à 400 meV pour laquelle les réactions majoritaires sont les absorptions neutroniques ( $n, \gamma$ ). La réponse du TLD est la fluence neutronique thermique pondérée par un facteur de réponse  $R = 0.45 \pm 0.45 \text{ Gy} \cdot (10^{12} \text{ neutron} \cdot \text{cm}^{-2})^{-1}$ .
- Une composante épithermique et rapide pour laquelle les réactions majoritaires sont les diffusions. Le facteur de réponse dépend de l'énergie du neutron. Il est tracé sur la Figure VII-9. L'incertitude sur la réponse neutronique obtenue est estimée à 50%.



**Figure VII-9 Sensibilité de la réponse des TLD CaF2 aux neutrons rapides et épithermiques**

Les incertitudes sur les facteurs de réponse neutron sont donc très élevées.

#### **VII.1.iv Normalisation à la puissance et à la durée d'irradiation**

Comme nous ne connaissons pas la valeur exacte du niveau de flux dans le cœur PERLE, les calculs d'énergie déposée avec TRIPOLI4 sont toujours normalisés à un neutron par unité de temps dans le réacteur. Pour interpréter les résultats en absolu, les résultats du calcul des énergies déposées dans les TLD doivent être normalisés à la puissance réelle du cœur. La dose étant une quantité intégrée dans le temps, il est également nécessaire d'intégrer les résultats sur la durée du palier de puissance.

Une chambre à fission est insérée en permanence en périphérie de la zone fissile à la place d'un crayon combustible. Pour effectuer la normalisation, il conviendrait de la simuler dans le cœur PERLE afin d'y estimer le taux de fission. Le facteur de normalisation correspondrait au rapport du taux de comptage mesuré sur le taux de fission calculé. Pour simuler la chambre à fission, il est nécessaire de connaître le plus précisément possible sa masse effective. L'expérience PERLE n'ayant pas été prévue à l'origine pour une interprétation en absolu des mesures, cette masse effective qui était connue au moment des mesures n'a pas été conservée. Il est à présent complexe de la recalculer sachant que les mesures ont été effectuées en 2009 avec un dispositif d'acquisition qui depuis a été changé.

Nous avons tout de même effectué une interprétation en absolu en nous basant sur les 10 W annoncés du palier de puissance. Pour cela, nous calculons avec TRIPOLI4 l'énergie totale déposée dans le cœur à chaque instant en ne simulant qu'un seul neutron. Le facteur de renormalisation est déduit du rapport de la puissance réelle sur cette puissance calculée. Ainsi, la dose déposée dans les TLD en absolu prend pour expression :

$$D = \frac{P_R}{P_C} \cdot \Delta t \cdot \frac{E_C}{m}$$

Avec :

- $E_c$  l'énergie déposée dans le TLD calculé par TRIPOLI4 [ $\text{J.s}^{-1}$ ],
- $M$  la masse du TLD [kg],
- $P_R$  et  $P_C$  les puissances réelle et calculée par TRIPOLI4 [W],
- $\Delta t$  la durée de l'irradiation [s].

La valeur  $P_R$  du palier de puissance possède une très forte incertitude. En effet, les 10 W correspondent à une interprétation grossière des mesures de la chambre à fission. Cette valeur fait en réalité office d'ordre de grandeur de la puissance dans le cœur. Nous



pouvons considérer que l'incertitude sur cette valeur en tant qu'estimateur de la puissance totale dégagée dans le cœur est de l'ordre de 20%. Les incertitudes sur les doses calculées après renormalisation seront donc du même ordre de grandeur.

## **VII.2 Interprétation des mesures dans la configuration « PERLE homogène »**

Dans cette partie, nous donnons les résultats obtenus avec TRIPOLI4 en utilisant la bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1 en simulant les TLD dans la configuration « PERLE homogène ». Les doses calculées seront comparées aux mesures afin de qualifier TRIPOLI4 et la bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1.

### **VII.2.i Dose déposée dans les TLD lors du calcul en une étape**

Nous avons calculé les doses déposées dans les TLD de type CaF2 à partir du calcul en 1 étape (couplage  $npe^+e^-$ ) en estimant individuellement les composantes prompte, retardée et neutronique. Afin d'améliorer la convergence, nous avons symétrisé le problème en simulant des TLD dans les 4 blocs réflecteur au lieu d'un seul comme c'était le cas lors des mesures. Les résultats sont donnés dans les Tableau VII-5 et Tableau VII-6. Les incertitudes sur chaque contribution rapportées à la dose totale sont données dans les Tableau VII-7 et Tableau VII-8. L'incertitude sur la dose totale a été calculée en sommant quadratiquement les incertitudes des 3 composantes. Celle-ci ne prend donc en compte que la convergence du calcul TRIPOLI4. Normalement, il conviendrait d'y ajouter les 20% d'incertitude liés au facteur de normalisation à la puissance.

**Tableau VII-5 Calcul de la contribution de chaque composante à la dose intégrée par les TLD CaF2 épais**

Position du TLD	Dose totale [mGy]	Contribution		
		Photon prompt [%]	Photon retardé [%]	Neutron [%]
Centre cœur	1030	79.7	15.4	5.0
Côté cœur	545	81.1	13.7	5.2
R2	177	87.8	7.6	4.6
R4	89.7	89.7	5.2	5.2
R6	51.1	91.0	2.9	6.1

R8	32.7	90.4	3.2	6.5
R10	22.9	92.1	0.7	7.2
R12	19.2	93.0	1.0	6.0
R14	21.3	96.1	0.0	3.8

**Tableau VII-6 Incertitude de calcul sur la dose intégrée par les TLD CaF2 épais**

Position du TLD	Dose totale [%]	Incertitude à 1 $\sigma$ rapportée à la dose totale		
		Photon prompt [%]	Photon retardé [%]	Neutron [%]
Centre cœur	2.8	1.3	0.2	2.5
Coté cœur	3.2	1.8	0.3	2.6
R2	3.1	2.0	0.5	2.3
R4	3.8	2.8	0.4	2.6
R6	4.8	3.7	0.4	3.0
R8	5.3	4.2	0.6	3.2
R10	8.9	8.1	0.2	3.6
R12	6.3	5.6	0.0	3.0
R14	5.7	5.3	0.0	1.9

**Tableau VII-7 Calcul de la contribution de chaque composante à la dose intégrée par les TLD CaF2 fin**

Position du TLD	Dose totale [mGy]	Contribution		
		Photon prompt [%]	Photon retardé [%]	Neutron [%]
Centre cœur	1030	77.9	16.2	5.9
Coté cœur	577	80.7	13.4	5.9
R2	172	87.1	7.2	5.7
R4	94.8	87.6	6.2	6.2
R6	54.1	89.1	3.9	7.0
R8	33.2	90.4	1.8	7.8
R10	24.9	91.2	1.5	7.3

R12	19.0	92.1	0.4	7.5
R14	23.0	95.2	0.4	4.5

**Tableau VII-8 Incertitude de calcul sur la dose absolue intégrée par les TLD CaF2 fin**

Position du TLD	Dose totale [%]	Incertitude à 1σ rapportée à la dose totale		
		Photon prompt [%]	Photon retardé [%]	Neutron [%]
Centre cœur	3.4	1.7	0.3	3.0
Coté cœur	3.7	2.2	0.4	3.0
R2	3.8	2.4	0.6	2.9
R4	4.5	3.2	0.7	3.1
R6	5.3	3.9	0.7	3.5
R8	6.3	5.0	0.4	3.9
R10	7.2	6.2	0.9	3.6
R12	7.4	6.3	0.1	3.7
R14	6.5	6.1	0.2	2.2

L'incertitude sur la composante neutronique est presque uniquement liée aux facteurs de réponse (l'incertitude sur le calcul du flux neutronique calculé est négligeable). Par conséquent, l'incertitude totale sur la dose neutron (de l'ordre de 3% à 1σ) ne peut pas être améliorée. Pour les TLD situés dans la zone fissile, cette incertitude est du même ordre de grandeur que l'incertitude statistique sur la composante prompte. Celle-ci, à l'exception du dernier TLD, ne fait qu'augmenter avec l'éloignement du centre du cœur. Cela est dû à la diminution des sources photoniques liée à la diminution des taux de réaction neutronique (capture radiative, diffusion inélastique). Ainsi, l'incertitude sur la dose prompte en centre cœur est de 1.7% (1σ) et 1.3% (1σ) alors qu'elle atteint 6.1% (1σ) et 5.3% (1σ) à l'extrémité du réflecteur pour les deux types de TLD CaF2 fin et épais.

Nous avons calculé les doses relatives au centre cœur pour pouvoir les comparer aux mesures. Dans tous les points de calcul, les composantes photons prompts et photons retardés sont indépendantes entre tous les points de calcul. La composante neutronique est estimée à chaque fois en utilisant la même loi empirique qui est elle-même responsable de l'incertitude annoncée. Par conséquent, entre chaque point de mesure, cette composante est corrélée. La variance de la dose relative peut donc s'écrire :

$$\text{var}\left(\frac{D_i}{D_{cc}}\right) = \left(\frac{D_i}{D_{cc}}\right)^2 \left( \frac{\text{var}(D_{ip})}{D_i^2} + \frac{\text{var}(D_{ir})}{D_i^2} + \frac{\text{var}(D_{ccp})}{D_{cc}^2} + \frac{\text{var}(D_{ccr})}{D_{cc}^2} + \left( \frac{\sqrt{\text{var}(D_{in})}}{D_i} - \frac{\sqrt{\text{var}(D_{ccn})}}{D_{cc}} \right)^2 \right)$$

Avec :

- $D_i$  et  $D_{cc}$  les doses calculés au point i et en centre cœur,
- $D_{xp}$ ,  $D_{xr}$  et  $D_{xn}$  les composantes prompts, retardées et neutron à la dose totale.

Toutes les variances relatives qui sont données dans cette formule sont disponibles dans les Tableau VII-6 et Tableau VII-8. Nous pouvons constater que la corrélation des composantes neutrons a conduit à réduire la variance du rapport des doses.

Les doses relatives calculées ainsi que leurs incertitudes sont données dans le Tableau VII-9. L'incertitude sur les doses relatives est principalement due à la convergence de la composante prompt. L'incertitude sur la composante neutron est presque nulle.

**Tableau VII-9 Doses relatives calculées au centre cœur pour les TLD CaF2 fin et épais dans la configuration « PERLE homogène »**

Position du TLD	Dose relative au centre cœur			
	CaF2 fin		CaF2 épais	
	Dose	$\sigma$ [%]	Dose	$\sigma$ [%]
Centre cœur	1.	0	1.	0
Coté cœur	0.531	2.2	0.559	3.3
R2	0.174	2.5	0.166	3.6
R4	0.0917	3.1	0.0917	4.4
R6	0.0506	4.0	0.0524	5.0
R8	0.0322	4.5	0.0321	5.8
R10	0.0206	8.2	0.0241	7.4
R12	0.0190	5.7	0.0184	6.8
R14	0.0220	5.6	0.0222	6.8

## VII.2.ii Interprétation des mesures par la méthode du calcul en 1 étape

Nous avons comparé les résultats des calculs avec les doses relatives mesurées par les TLD. Celles-ci sont données dans le Tableau VII-10. Ces valeurs incluent la composante neutron.

**Tableau VII-10 Doses relatives au centre cœur mesurées pour les TLD CaF2 fin et épais**

Position du TLD	Dose relative au centre cœur			
	CaF2 fin		CaF2 épais	
	Dose	$\sigma$ [%]	Dose	$\sigma$ [%]
Centre cœur	1.	0	1.	0
Coté cœur	0.5451	4.2	0.5489	3.3
R2	0.1773	5.7	0.1700	4.7
R4	0.08784	5.5	0.08830	4.7
R6	0.05174	5.5	0.05299	4.7
R8	0.03210	5.5	0.03175	4.7

R10	0.02298	5.5	0.02298	4.9
R12	0.01903	5.7	0.01864	4.7
R14	0.02020	5.5	0.01903	4.7

Nous avons représenté les doses relatives mesurées et calculées sur les Figure VII-10, Figure VII-11, Figure VII-12 et Figure VII-13.

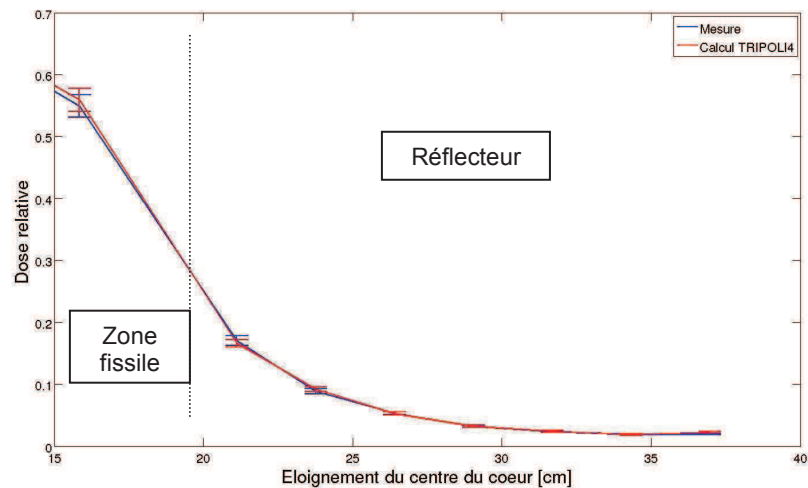


Figure VII-10 Doses relatives mesurées et calculées dans les TLD CaF<sub>2</sub> épais

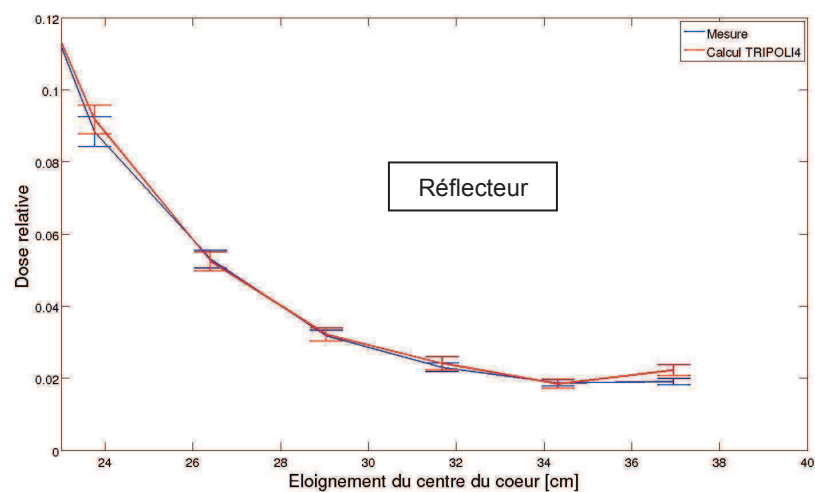


Figure VII-11 Doses relatives mesurées et calculées dans les TLD CaF<sub>2</sub> épais dans le réflecteur

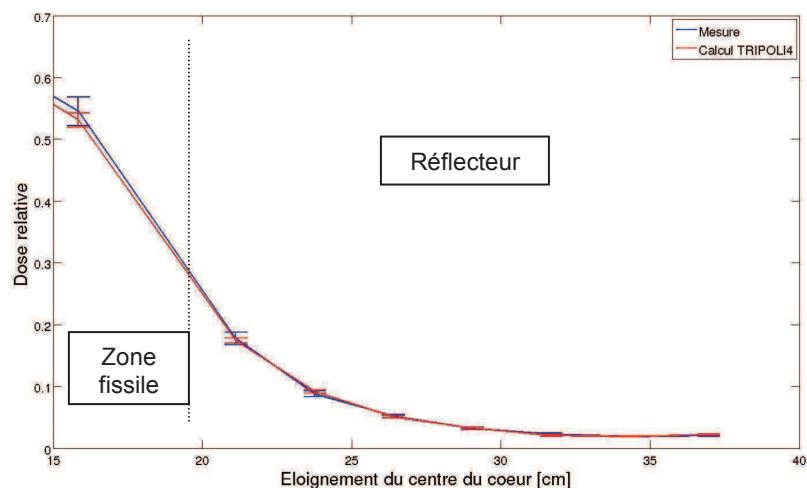


Figure VII-12 Doses relatives mesurées et calculées dans les TLD CaF2 fin

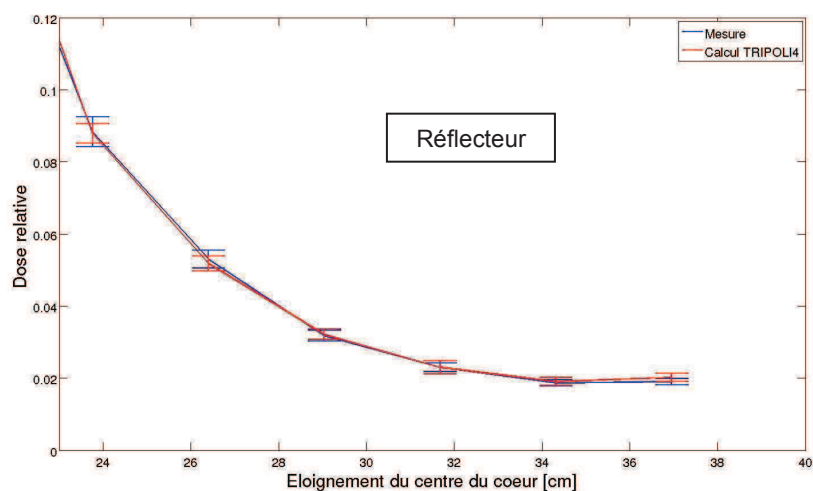


Figure VII-13 Doses relatives mesurées et calculées dans les TLD CaF2 fin dans le réflecteur

A l'exception de la position R14, les doses calculées et les doses mesurées se recoupent systématiquement à  $1\sigma$ . Les écarts calcul/mesure sont donnés dans le Tableau VII-11. Les incertitudes de calcul et de mesure sont décorréliées. L'incertitude sur le rapport calcul sur expérience s'écrit donc :

$$\text{var}\left(\frac{C}{E} - 1\right) = \left(\frac{C}{E}\right)^2 \left( \frac{\text{var}(C)}{C^2} + \frac{\text{var}(E)}{E^2} \right)$$

Tableau VII-11 Ecart calcul-mesure sur la dose mesurée par les TLD de type CaF2

Position du TLD	CaF2 épais		CaF2 fin	
	(C-E)/E [%]	$\sigma$ [%]	(C-E)/E [%]	$\sigma$ [%]
Centre cœur	-	-	-	-
Coté cœur	0.4	4.0	2.5	5.5
R2	2.3	5.4	-6.3	6.3
R4	3.8	5.9	4.5	7.3

R6	-4.5	5.9	1.3	7.5
R8	1.4	6.6	0.1	8.0
R10	-10.5	8.6	4.9	9.7
R12	1.9	7.5	-3.2	8.6
R14	15.5	8.5	10.0	9.7
Tout réflecteur	1.6	6.1	-1.0	7.3

A l'exception du point R10 pour le CaF<sub>2</sub> épais et des deux points situés au bout du réflecteur en position R14, tous les écarts entre calcul et mesure sont situés dans l'intervalle  $[-\sigma, \sigma]$ . Ils sont donc proches de 0. Cependant, les incertitudes restent très importantes, surtout pour les points situés au bout du réflecteur ( $\sigma \approx 9\%$ ). Cette incertitude est beaucoup plus importante que l'incertitude expérimentale. Nous sommes donc limités par la précision du calcul. L'augmentation brusque de l'incertitude sur le calcul de la dose en position R10 n'a pas pu être expliquée. Nous supposons qu'un saut de variance s'est introduit pendant le calcul Monte Carlo. Cependant, nous n'avons pas réussi à le mettre en évidence.

Nous avons également calculé l'écart calcul expérience moyen dans tout le réflecteur. Cette moyenne a été calculée en pondérant chaque C/E individuel par la dose relative mesurée contenue dans le Tableau VII-10. Afin de majorer l'incertitude sur cette quantité, nous avons considéré que tous les C/E étaient corrélés. Nous pouvons constater que sur l'ensemble du réflecteur, les écarts calcul-mesure sont inférieurs à l'incertitude.

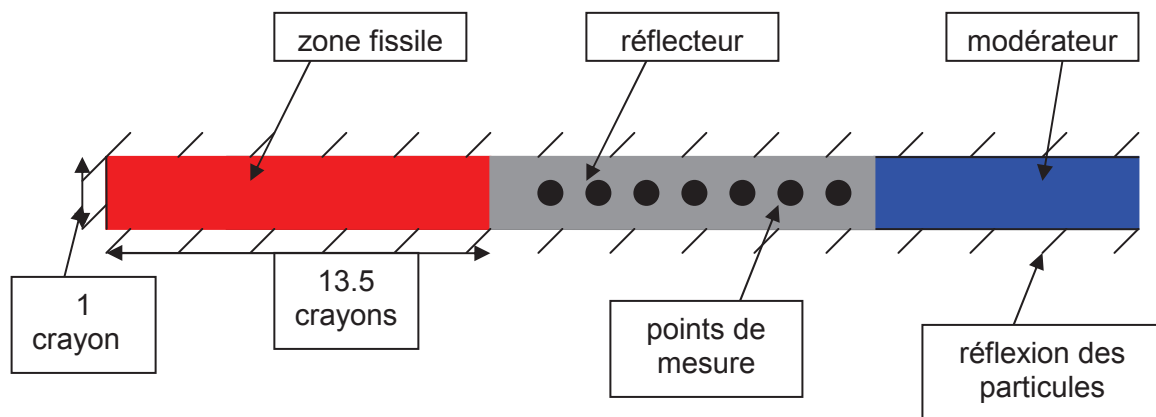
### **VII.2.iii Interprétation des mesures par la méthode du calcul en deux étapes avec géométrie simplifiée**

Pour rappel, le calcul en deux étapes avec une géométrie simplifiée a été envisagé afin de réduire l'incertitude sur le calcul de la composante prompte de la dose intégrée par les TLD.

La géométrie simplifiée est représentée sur la Figure VII-14. Elle est constituée de la traverse centrale contenant une rangée de crayon et son prolongement jusqu'à la cuve qui contient le réflecteur et les 7 points de mesure. Nous avons symétrisé ce problème en coupant cette traverse en deux. La rangée de crayon n'en contient donc que 13.5 au lieu des 27. Des conditions de réflexion ont été imposées sur le plan coupant le demi-crayon en deux. Sur l'axe z, les géométries sont identiques à celles observées dans le cœur complet. La hauteur des crayons et de la cuve sont respectés. Tous les composants des crayons autres que le combustible sont pris en compte. Nous avons imposé des conditions de fuite selon l'axe z et du côté de la cuve. Sur les deux derniers cotés de la géométrie simplifiée, nous avons imposé des conditions de réflexion. Par conséquent, selon l'axe transverse les TLD sont dans un milieu infini.

La géométrie simulée est décrite sur la Figure VII-14





**Figure VII-14 Représentation de la géométrie simplifiée**

Pour déterminer cette géométrie, nous avons implicitement considéré que dans les plans perpendiculaires à l'axe des crayons combustibles, le flux neutronique et par conséquent les sources  $\gamma$  ne dépendent que de la profondeur de pénétration dans le réflecteur. Le flux est donc constant selon l'axe perpendiculaire à l'alignement des TLD. Cette propriété est bien évidemment fautive dans la géométrie cœur complet. Cependant, on peut considérer qu'autour de l'axe central du réflecteur, c'est-à-dire l'axe contenant les TLD, le flux neutronique varie faiblement. Nous pouvons le constater sur la Figure VII-3. Les taux de fission varient peu entre les crayons situés sur les coordonnées 10-27 à 18-27, c'est-à-dire autour de la traverse centrale. Cela représente une distance de l'ordre de 4 cm, soit le libre parcours moyen des photons dans l'acier. Par conséquent, pour les TLD, qui sont situés au centre du réflecteur, le flux neutronique, donc les sources et le flux photonique semblent plats. Pour les TLD, la géométrie semble donc infinie dans ces directions.

#### VII.2.iii.a Comparaison des flux calculés dans la géométrie simplifiée et cœur complet

Nous avons vu dans le paragraphe VII.1.i.c que la méthode de la géométrie simplifiée était basée sur l'égalité des spectres de flux normalisés dans les géométries simplifiées et cœur complet. Nous avons calculé le flux photonique à 94 groupes avec TRIPOLI4 dans les géométries simplifiées et cœur complet dans plusieurs volumes :

- Les TLD,
- Les TLD + les piluliers,
- Les TLD + les piluliers + un volume d'acier du réflecteur englobant le tout.

Le flux photonique calculé dans les TLD dans la géométrie cœur complet n'est pas assez bien convergé groupe par groupe pour que la comparaison avec la géométrie simplifiée soit possible. De plus, la dose dans les TLD dépend du flux dans et autour des TLD. Le flux calculé uniquement à l'intérieur d'un TLD n'aurait pas été satisfaisant pour effectuer la normalisation. Afin d'estimer la « ressemblance » des spectres de flux photonique dans les deux géométries, nous avons calculé leurs coefficients de corrélation linéaire. Ces coefficients sont donnés dans Tableau VII-12:

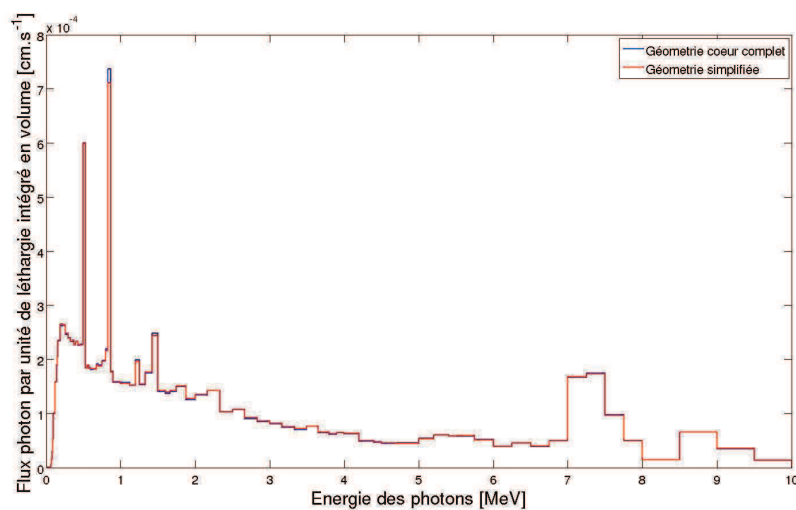
**Tableau VII-12 Corrélation entre les spectres de flux photonique calculé dans la géométrie simplifiée et dans la géométrie cœur complet pour différents volumes autour des points de mesure**

Position des TLD	Coefficient de corrélation	
	Pilulier +TLD	Pilulier+TLD +volume englobant

R2	0.9999	0.9999
R4	0.9999	0.9999
R6	0.9999	0.9999
R8	0.9998	0.9998
R10	0.9995	0.9995
R12	0.9994	0.9994
R14	0.9995	0.9995

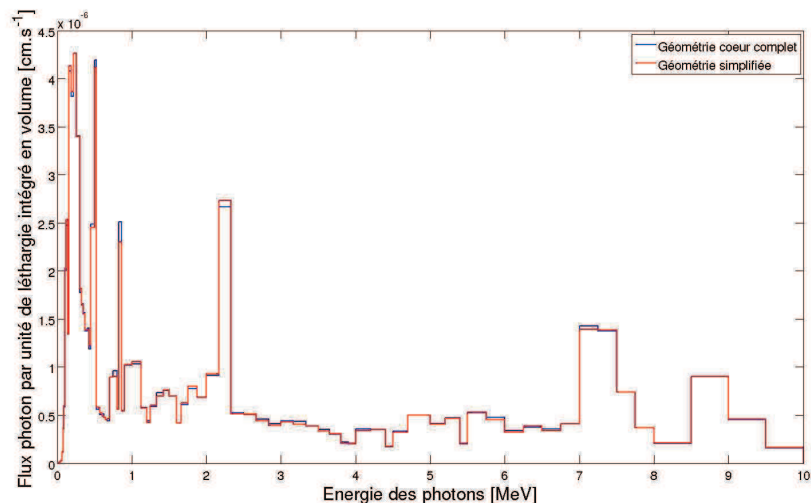
Ces coefficients sont tous supérieurs à 0.999. Cela indique qu'à un facteur près, les spectres calculés dans les deux géométries sont semblables. Le facteur de normalisation est ensuite calculé par la formule des moindres carrés.

Nous avons tracé les spectres de flux normalisés obtenu dans les volumes pilulier+TLD en position R2 et R14. Ils sont disponibles sur les Figure VII-15 et Figure VII-16. Nous pouvons constater que dans les deux cas, à l'exception du groupe contenant les photons émis par la diffusion inélastique du  $^{56}\text{Fe}$  à 847 keV et 2085 keV, le spectre de flux photonique dans la géométrie cœur complet est très bien reproduit dans la géométrie simplifiée. Par conséquent, la dose réelle déposée dans les TLD peut être approximée par la dose calculée dans la géométrie simplifiée pondérée par un facteur de normalisation déduit du rapport des flux photoniques.



S

**Figure VII-15 Comparaison des flux photoniques autour des TLD en position R2 dans les géométries cœur complet et simplifiée**



**Figure VII-16 Comparaison des flux photoniques autour des TLD en position R14 dans les géométries cœur complet et simplifiée**

Nous avons estimé le biais introduit par cette méthode en intégrant les spectres de flux pondérés par l'énergie  $\gamma$  moyenne dans chaque groupe. Cette quantité a l'avantage de donner un poids plus important aux groupes de photon de hautes énergies, comme c'est le cas dans le calcul du KERMA ou de la dose.

Les différences maximales observées entre les spectres dans les deux géométries sont de 0.5%.

#### VII.2.iii.b Comparaison calcul-mesure

Grâce à la méthode de la géométrie simplifiée, nous avons obtenu une bien meilleure convergence du calcul de la composante prompt de la dose déposée dans les TLD. Cette convergence est systématiquement inférieure à 1% et atteint même 0.3% pour les TLD situés en position R2. Les nouvelles comparaisons calcul-mesure sont présentées dans le Tableau VII-13.

**Tableau VII-13 Ecart calcul-mesure sur la dose relative déposée dans les TLD de type CaF2 avec la méthode du calcul en deux étapes avec géométrie simplifiée**

Position du TLD	CaF2 épais		CaF2 fin	
	C/E-1 [%]	$\sigma$ [%]	C/E-1 [%]	$\sigma$ [%]
Centre cœur	0.0	-	0.0	-
Coté cœur	+0.4	4.2	+2.5	5.5
R2	-1.5	5.1	-0.7	6.1
R4	-0.9	5.0	+2.4	6.2
R6	-6.0	4.7	-0.4	5.9
R8	+0.6	5.1	+0.2	6.0
R10	-2.9	5.1	-0.2	6.2
R12	+0.6	5.0	-1.4	6.1
R14	+9.3	5.7	+6.0	6.5
Tout réflecteur	+0.0	5.0	+0.4	6.1

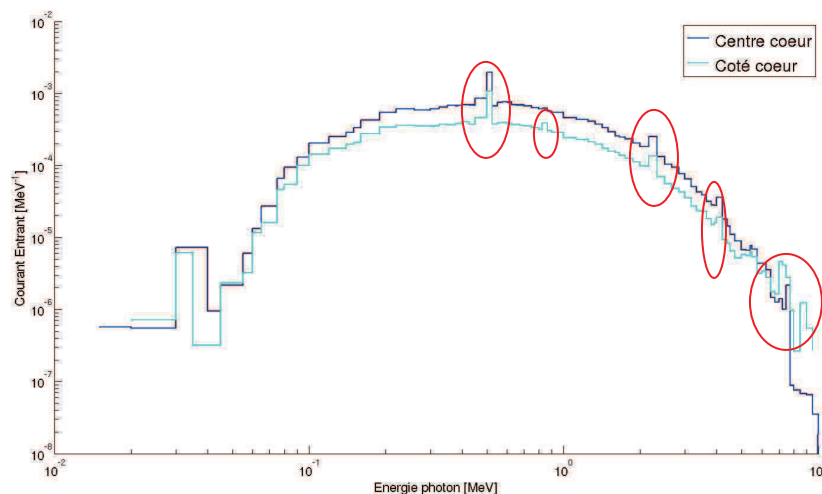
Ces résultats sont en accord avec ceux déjà observés dans le Tableau VII-11. Nous n'observons plus le fort écart calcul-expérience en position R10 que nous avons attribué à un saut de variance. Nous constatons qu'avec la méthode de la géométrie simplifiée, les incertitudes sur les écarts calcul-expérience sont presque égales aux incertitudes liées aux mesures. Cela signifie qu'il n'est plus utile de chercher à améliorer la précision du calcul.

A l'exception des TLD situés en position R14, les résultats obtenus sont en très bon accord avec les mesures. Nous pouvons en déduire que la bibliothèque JEFF-3.1.1 associée au code de calcul TRIPOLI4.8 permet d'obtenir de très bons accords calcul-expérience dans le cas du calcul de l'échauffement  $\gamma$  dans un réflecteur en acier.

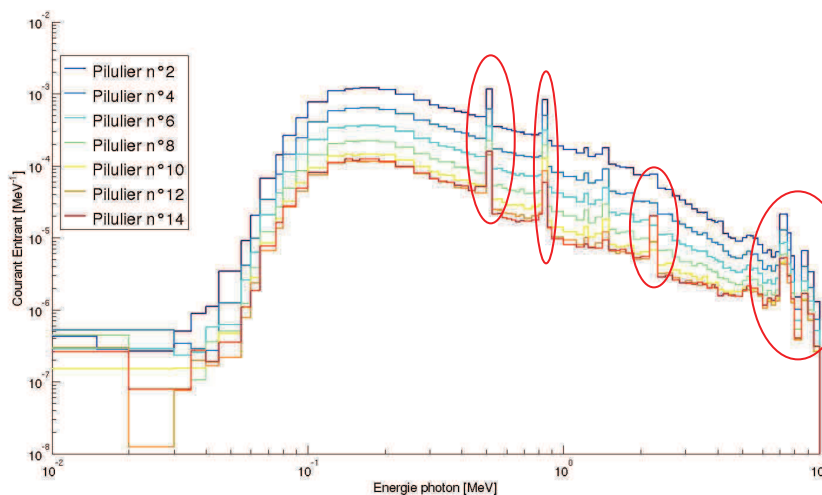
#### **VII.2.iv Interprétation des mesures avec la méthode du calcul en deux étapes avec stockage des particules**

##### **VII.2.iv.a Courants et productions de photons dans les volumes englobant les piluliers**

Pour le calcul en deux étapes de la dose prompt  $\gamma$ , nous avons dû stocker les productions de photons dans le volume englobant les TLD ainsi que le courant entrant. Nous avons représenté les spectres de courant entrant dans le volume englobant pour les TLD situés dans le cœur et dans le réflecteur sur les Figure VII-17 et Figure VII-18. Ces spectres ont été calculés par TRIPOLI4 avec la réponse « COURANT PHOTON ».



**Figure VII-17 Courant de photons autour des piluliers situés dans la zone fissile**



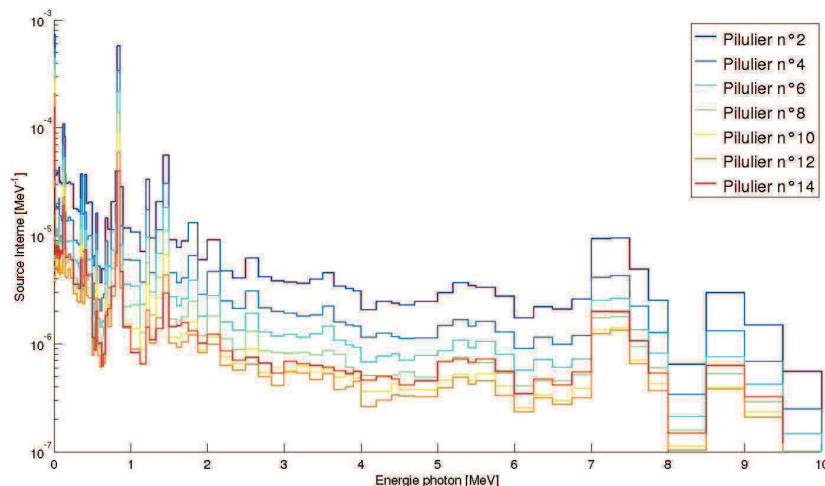
**Figure VII-18 Courant de photons autour des piluliers situés dans le réflecteur**

Dans la zone fissile, nous reconnaissons les pics caractéristiques de l'annihilation des positons à 511 keV, de la capture de l'eau à 2.2 MeV et de la capture de  $^{238}\text{U}$  à 4.1 MeV. Certains pics caractéristiques de l'acier apparaissent également autour du pilulier situé en périphérie de la zone fissile à 847 keV et autour de 7.6 MeV. Ce sont les  $\gamma$  émis lors de la diffusion inélastique et la capture radiative des neutrons sur le  $^{56}\text{Fe}$ .

Dans le réflecteur, nous reconnaissons pour chaque pilulier les deux pics du  $^{56}\text{Fe}$  cités juste avant ainsi que d'autres tels que : les photons primaires de capture du  $^{53}\text{Cr}$  et du  $^{58}\text{Ni}$  autour de 9 MeV et la diffusion inélastique sur le premier niveau du  $^{52}\text{Cr}$  à 1.4 MeV. Dans le pilulier situé en position R14, nous pouvons observer l'apparition du photon émis par la capture radiative de l'eau à 2.2 MeV.

Quel que soit le positionnement du pilulier, il apparaît sur ces graphiques qu'aucun photon dont l'énergie est inférieure à 50 keV n'entre dans la géométrie englobant les piluliers. Tous les photons émis à cette énergie sont presque immédiatement absorbés.

Nous avons représenté les sources photoniques calculées à l'intérieur du volume englobant. Elles sont représentées sur la Figure VII-19. De nouveaux pics situés à des énergies inférieures au seuil de coupure précédent sont identifiables tels que ceux caractéristiques de la diffusion inélastique sur les deux premiers niveaux du  $^{57}\text{Fe}$  situés à 14 et 140 keV.



**Figure VII-19 Production de photon dans les piluliers situés dans le réflecteur**

#### VII.2.iv.b Résultats obtenus avec le calcul en deux étapes avec stockage des particules

Le calcul en deux étapes avec stockage des particules est destiné à améliorer la convergence de la composante prompt de la dose mesurée par les TLD. Les résultats obtenus avec cette méthode ne sont pas concluants. Les écarts par rapport à la méthode de référence peuvent être bien plus importants que l'incertitude associée. Ainsi, dans le pilulier situé sur le côté de la zone fissile, les écarts entre les deux calculs atteignent 15% sur la dose totale. De plus, le gain sur la convergence est bien moins important que pour le calcul en deux étapes avec géométrie simplifiée. Ce gain est à peu près d'un facteur 2 par rapport au calcul de référence.

Nous n'avons pas pu déterminer l'origine des biais observés. Cependant, en appliquant cette méthode à des cas simple, nous avons pu mettre en évidence certains problèmes liés à TRIPOLI4 lors de la transcription des sources stockées dans les fichiers au format ASCII.

Par conséquent, nous ne pouvons pas à l'heure actuelle valider la méthode de calcul en deux étapes avec stockage des particules.

### **VII.3 Interprétation des mesures dans la configuration « PERLE trou d'eau »**

Pour l'interprétation de « PERLE trou d'eau », nous n'avons effectué l'interprétation qu'avec le calcul en 1 étape.

La présence des trous d'eau ne permettait pas de réutiliser la géométrie simplifiée utilisée pour l'interprétation des mesures « PERLE homogène ». En effet, l'hypothèse principale utilisée dans le cas « homogène » qui consistait à supposer le flux neutronique comme constant le long de l'axe transverse à l'alignement des TLD n'est plus applicable à cause des hétérogénéités que constituent les trous d'eau sur ce même axe. Il n'est pas non plus possible de prendre en compte une infinité de trous d'eau en utilisant une traverse constituée de plusieurs rangées de crayon. En effet, l'espacement entre les trous d'eau n'est pas un multiple de l'espacement entre les crayons.

La méthode du stockage des sources n'ayant pas été concluante dans le cas « homogène », nous ne l'avons pas non plus réessayée.

Contrairement à la géométrie « PERLE homogène », la géométrie « PERLE trou d'eau » ne peut pas être symétrisée. En effet, l'ajout de nouveaux trous d'eau dans les

autres blocs réflecteur joue trop sur la valeur du  $k_{\text{eff}}$ . Le calcul des doses dans les TLD est très affecté (les différences atteignent 10%). Ainsi, les incertitudes sur les calculs sont cette fois-ci 2 fois plus élevées que dans le cas PERLE homogène puisque nous avons simulé 4 fois moins de TLD.

### VII.3.i Dose absolue déposée dans les TLD

Les doses absolues obtenues avec le calcul en une étape ainsi que les incertitudes associées sont disponibles dans les Tableau VII-14, Tableau VII-15, Tableau VII-16, Tableau VII-17.

**Tableau VII-14 Calcul de la contribution de chaque composante à la dose intégrée par les TLD CaF2 épais**

Position du TLD	Dose totale [mGy]	Contribution		
		Photon prompt [%]	Photon retardé [%]	Neutron [%]
Centre cœur	1040	78.4	16.6	5.0
Coté cœur	553	79.2	15.7	5.1
R2	204	89.4	6.4	4.2
R4	118	91.1	4.8	4.1
R6	73.2	92.7	3.1	4.2
R8	55.9	94.8	1.4	3.8
R10	40.0	95.3	1.1	3.6
R12	26.8	95.8	0.6	3.6
R14	25.9	96.7	0.4	2.9



**Tableau VII-15 Incertitude de calcul sur la dose absolue intégrée par les TLD CaF2 épais**

Position du TLD	Dose totale [%]	Incertitude à $1\sigma$ rapportée à la dose totale		
		Photon prompt [%]	Photon retardé [%]	Neutron [%]
Centre cœur	3.1	1.8	0.2	2.5
Coté cœur	3.5	2.3	0.3	2.6
R2	4.2	3.7	0.3	2.1
R4	5.3	4.9	0.4	2.1
R6	5.9	5.5	0.3	2.1
R8	7.5	7.2	0.3	1.9
R10	8.5	8.3	0.3	1.8
R12	9.3	9.1	0.2	1.8
R14	10.0	9.9	0.2	1.5

**Tableau VII-16 Calcul de la contribution de chaque composante à la dose intégrée par les TLD CaF2 fin**

Position du TLD	Dose totale [mGy]	Contribution		
		Photon prompt [%]	Photon retardé [%]	Neutron [%]
Centre cœur	1060	78.5	16.6	4.9
Coté cœur	584	80.3	14.8	4.9
R2	203	89.1	6.9	4.0
R4	119	91.0	4.9	4.1
R6	71.9	92.8	2.9	4.3
R8	53.1	95.0	1.1	3.9
R10	34.7	94.9	1.1	4.0
R12	27.9	96.1	0.4	3.5
R14	27.3	97.1	<0.1	2.9

**Tableau VII-17 Incertitude de calcul sur la dose absolue intégrée par les TLD CaF2 fin**

Position du TLD	Dose totale [%]	Incertitude à $1\sigma$ rapportée à la dose totale		
		Photon prompt [%]	Photon retardé [%]	Neutron [%]
Centre cœur	3.3	2.2	0.3	2.5
Coté cœur	3.8	2.9	0.4	2.5
R2	4.9	4.4	0.4	2.0
R4	6.2	5.8	0.4	2.0
R6	7.9	7.6	0.4	2.2
R8	9.3	9.1	0.3	2.0
R10	10.5	10.3	0.4	2.0
R12	11.5	11.4	0.2	1.7
R14	12.0	12.0	<0.1	1.4

Nous constatons bien que les incertitudes sont cette fois-ci supérieures à 10% dans les TLD situés les plus loin de la zone fissile.

Nous pouvons constater que la dose déposée dans les TLD situés dans le réflecteur a augmenté par rapport à la configuration « PERLE homogène ». En position R2, cette augmentation est d'environ 15%. En position R14, cette augmentation atteint près de 60%. Les trous d'eau ont créé une thermalisation neutronique locale qui a favorisée la capture radiative dans l'acier et par conséquent la production de photon de haute énergie.

L'introduction de canaux d'eau dans le réflecteur induit donc une augmentation de la quantité de chaleur produite dans celui-ci. Dans un réacteur nucléaire, la chaleur évacuée par les canaux d'eau doit donc être supérieure à l'augmentation de la chaleur produite dans le réflecteur.

Nous avons calculé la dose relative au centre cœur. Les résultats sont donnés dans le Tableau VII-18.

**Tableau VII-18 Dose relative au centre cœur calculée pour les TLD de type CaF2 dans la configuration « PERLE trou d'eau »**

Position du TLD	Dose relative au centre cœur			
	CaF2 fin		CaF2 épais	
	Dose	$\sigma$ [%]	Dose	$\sigma$ [%]
Centre cœur	1	-	1	-
Coté cœur	0.557	4.1	0.534	3.0
R2	0.211	5.3	0.197	4.1
R4	0.124	6.5	0.114	5.3
R6	0.075	8.2	0.071	5.9
R8	0.055	9.5	0.054	7.5
R10	0.036	10.7	0.039	8.6
R12	0.029	11.7	0.026	9.3
R14	0.029	12.3	0.025	10.1

### VII.3.ii Comparaison calcul-mesure

Nous avons comparé les résultats des calculs de dose relative avec les mesures des TLD. Celles-ci sont données dans le Tableau VII-19 les doses relatives mesurées par les TLD.

**Tableau VII-19 Doses relatives au centre cœur mesurées pour les TLD CaF2 fin et épais**

Position du TLD	Dose relative au centre cœur			
	CaF2 fin		CaF2 épais	
	Dose	$\sigma$ [%]	Dose	$\sigma$ [%]
Centre cœur	1.	-	1.	-
Coté cœur	0.553	5.3	0.547	3.9
R2	0.195	9.2	0.192	6.8
R4	0.115	9.2	0.119	6.8
R6	0.073	9.2	0.079	6.8
R8	0.051	9.2	0.0051	6.8
R10	0.037	9.2	0.038	6.8
R12	0.028	9.3	0.031	6.8
R14	0.024	9.2	0.025	6.8

Les comparaisons calcul-expérience sont données dans le Tableau VII-20

**Tableau VII-20 Ecart calcul-mesure sur la dose relative mesurée par les TLD de type CaF2**

Position du TLD	CaF2 épais		CaF2 fin	
	(C-E)/E [%]	$\sigma$ [%]	(C-E)/E [%]	$\sigma$ [%]
Centre cœur	-	-	-	-
Coté cœur	-2.4	5.1	-0.4	6.5
R2	+2.5	8.2	+2.0	10.6
R4	-4.1	8.3	+0.2	11.1
R6	-10.6	8.1	-5.6	11.5
R8	+5.8	10.7	-1.1	12.9
R10	+1.5	11.1	-10.9	12.4
R12	-16.5	9.6	-6.0	13.9
R14	-0.2	12.1	+7.2	16.2
Tout réflecteur	-1.9	8.9	-0.9	11.6

Les incertitudes associées à ces écarts calcul-expérience sont très importantes. Nous constatons tout de même qu'à l'exception des deux points situés en position R6 et R12 mesurés par les TLD de type CaF2 épais, toutes ces valeurs sont inférieures à  $1\sigma$ .

## **VII.4 Dose déposée dans les matériaux du réacteur PERLE**

Afin de connaître les échauffements réels dans les matériaux du cœur PERLE, nous avons effectué d'autres calculs dans lesquels nous ne simulons pas les TLD et les piluliers. Dans le réflecteur, les piluliers ont été remplacés par un volume d'acier, dans la zone fissile, ils ont été remplacés par un volume d'acier ou un volume de combustible. Nous avons ensuite estimé la dose dans chacun de ces volumes.

Ces volumes sont beaucoup plus grands que les TLD. Par conséquent la convergence du calcul sera bien meilleure. De plus, l'équilibre électronique étant atteint, la dose peut être estimée par le KERMA, rendant inutile la simulation du transport des électrons. Le calcul de la dose dans les matériaux est donc très allégé par rapport au calcul de la dose dans les TLD.

Afin de se placer dans un contexte plus général, non spécifique à l'expérience PERLE, la dose retardée a été calculée avec un spectre de  $\gamma$  retardé à l'équilibre. Pour cela, nous avons résolu l'équation de Bateman stationnaire en négligeant les termes de capture. Un calcul d'ordre de grandeur a permis d'envelopper l'incidence de ces termes de capture à 2% de l'énergie totale émise par les  $\gamma$  retardés de fission. Celle-ci est ainsi de 5.97 MeV à 2% près au lieu des 2.82 MeV caractéristiques de l'expérience PERLE. Nous ne prenons pas en compte la dose liée aux captures des produits de fission. Nous nous plaçons donc à un burn-up nul.

### **VII.4.i Résultats obtenus dans la configuration « PERLE homogène »**

Dans le Tableau VII-17, nous donnons les énergies déposées par les photons et les neutrons calculées au niveau des 9 points de mesures des TLD ainsi que dans la totalité du réflecteur en acier. Ces résultats sont normalisés à une puissance totale de 10 W dans le cœur pour une irradiation de 10 minutes. Nous constatons que dans la zone fissile du cœur

PERLE, dans le combustible, l'énergie totale déposée est à plus de 92% due aux neutrons alors que dans l'acier, cette contribution n'est plus que de 5%. Dans le réflecteur en acier, le phénomène s'inverse, l'énergie déposée par les photons représente entre 92% et 96% de la dose totale. Cette dose photon est majoritairement due aux photons prompts. Sur l'ensemble du réflecteur, la dose retardée ne représente que 12% de la dose photon totale tandis que dans la zone fissile, cette proportion est de 39% et de 41% en périphérie et au centre dans le combustible tandis que dans l'acier est de 33% et 31%. Ainsi, pour les calculs d'échauffement dans les réacteurs, il est indispensable de traiter la dose retardée indépendamment de la dose prompte.

**Tableau VII-21 Energie déposée par les photons prompts et retardés ainsi que les neutrons dans le combustible et l'acier dans la configuration « PERLE homogène »**

Position du calcul	Photon					Neutron	
	Prompt		Retardé		Ratio [%]		
	Dose [mGy]	$\sigma$ [%]	Dose [mGy]	$\sigma$ [%]		Dose [mGy]	$\sigma$ [%]
Centre cœur $\text{UO}_2$	1590	0.3	1090	0.4	40.7	33900	0.2
Centre cœur acier	620	0.3	311	0.5	33.4	12.6	0.9
Côté cœur $\text{UO}_2$	916	0.4	584	0.6	38.9	19900	0.3
Côté cœur acier	356	0.4	161	1.2	31.1	12.7	1.3
R2	164	0.1	29.9	0.5	15.5	7.5	0.3
R4	83.3	0.2	9.9	0.9	10.7	4.9	0.3
R6	48.8	0.2	3.9	1.5	7.6	3.4	0.3
R8	31.1	0.3	1.6	2.4	4.8	2.4	0.3
R10	21.9	0.3	0.6	3.8	2.8	1.7	0.4
R12	18.7	0.4	0.3	5.8	1.5	1.2	0.4
R14	21.8	0.4	0.1	9	0.5	0.8	0.5
Tout réflecteur	37.8	<0.01	5.3	0.02	12.3	1.82	0.01

Sur les Figure VII-20 Figure VII-21 Figure VII-22, nous avons tracé les différentes contributions absolue et relative des photons et des neutrons à la dose totale. Dans la zone fissile, nous avons tracé en trait plein la dose dans le combustible et en trait pointillé la dose dans l'acier.

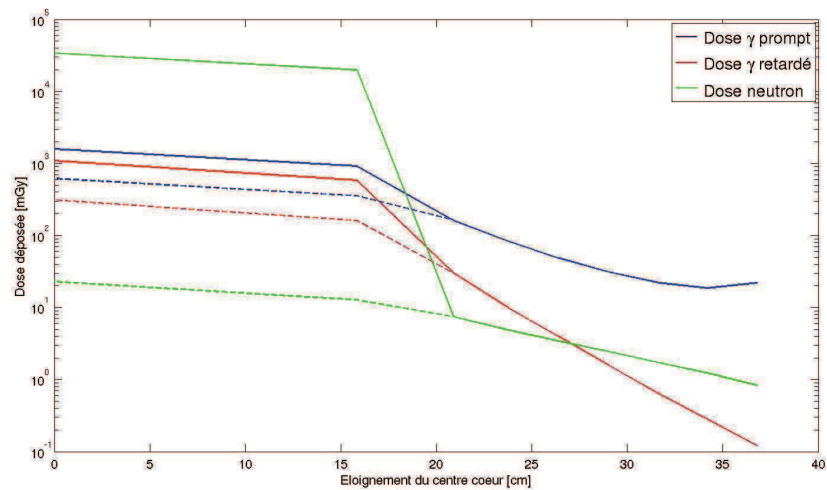


Figure VII-20 Dose déposée par les neutrons et les photons dans le combustible (trait plein) et l'acier (trait pointillé) dans l'expérience PERLE

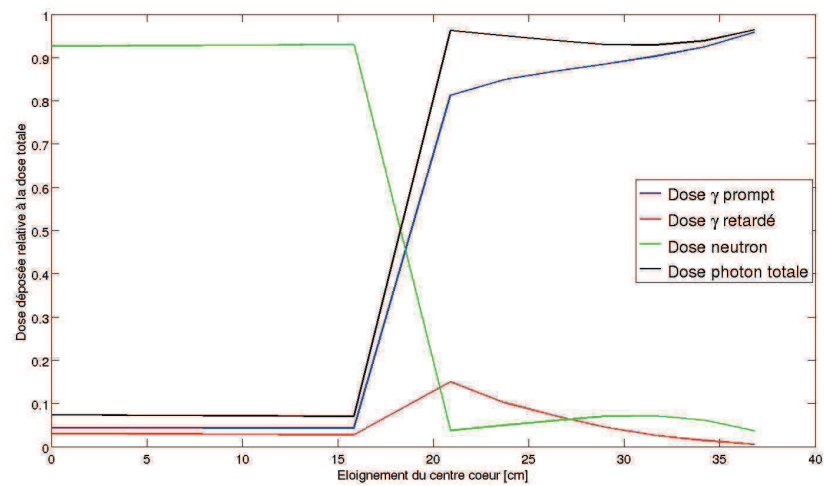


Figure VII-21 Dose relative à la dose totale déposée dans le combustible de la zone fissile et dans l'acier du réflecteur

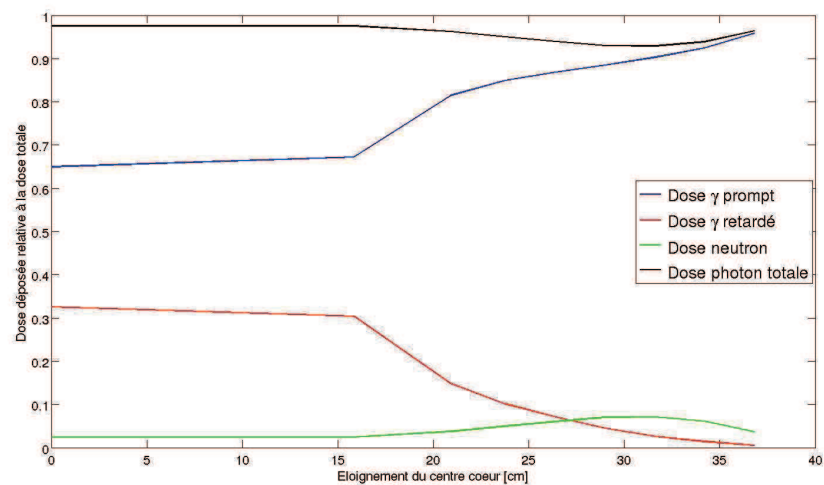


Figure VII-22 Dose relative à la dose totale déposée dans l'acier de la zone fissile et dans l'acier du réflecteur

Nous remarquons que dans le réflecteur, à mesure que l'on s'éloigne de la zone fissile, la dose déposée diminue puis augmente en périphérie. Cette variation est due à la présence d'eau modératrice de ce côté du réflecteur qui thermalise les neutrons et favorise la capture radiative. Nous pouvons voir cet effet sur la Figure VII-23. En effectuant un calcul TRIPOLI4 en simulant du vide autour du réflecteur à la place de l'eau, la remontée de la dose disparaît.

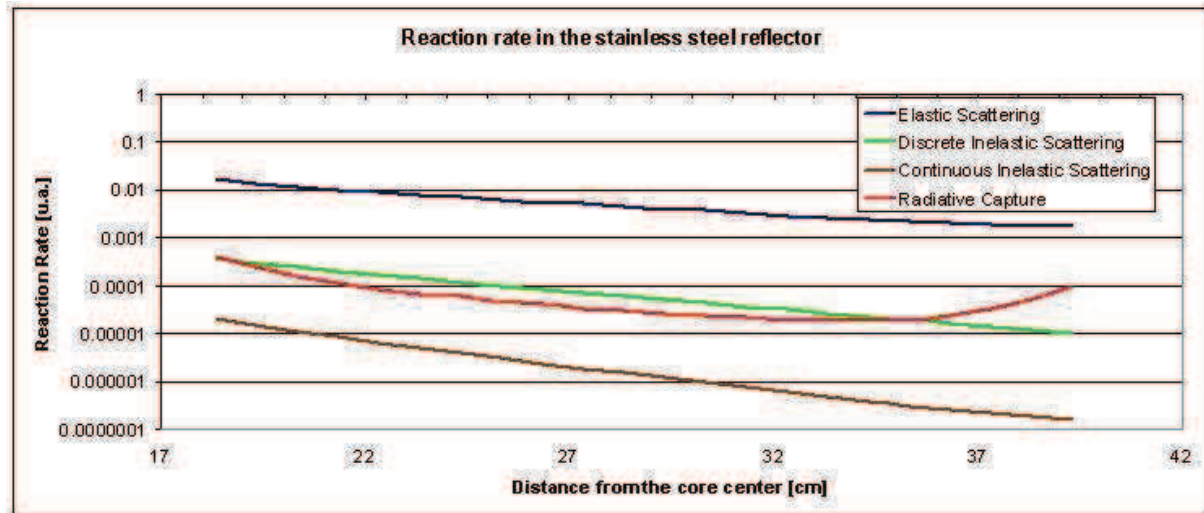


Figure VII-23 Taux de réaction neutronique dans le réflecteur de l'expérience PERLE

#### VII.4.ii Résultats obtenus dans la configuration « PERLE trou d'eau »

Le même calcul a été effectué dans la configuration « PERLE trou d'eau ». Les résultats sont donnés dans le Tableau VII-24.



**Tableau VII-22 Energie déposée par les photons prompts et retardés ainsi que les neutrons dans le combustible et l'acier dans la configuration « PERLE homogène »**

Position du calcul	Photon					Neutron	
	Prompt		Retardé		Ratio [%]		
	Dose [mGy]	$\sigma$ [%]	Dose [mGy]	$\sigma$ [%]		Dose [mGy]	$\sigma$ [%]
Centre cœur UO <sub>2</sub>	1600	0.3	963	0.1	37.5	34000	0.2
Centre cœur acier	623	0.4	282	0.1	31.1	23.2	1.5
Côté cœur UO <sub>2</sub>	903	0.5	511	1.8	36.1	19200	0.3
Côté cœur acier	350	0.6	142	2.6	28.9	12.1	1.9
R2	189	0.3	32.3	0.3	14.6	6.8	0.8
R4	114	0.4	11.5	0.6	9.2	4.3	1.0
R6	76.1	0.5	4.7	1.0	5.8	2.8	1.1
R8	52.9	0.6	2.0	1.6	3.6	1.9	1.2
R10	38.3	0.8	0.8	2.5	2.1	1.3	1.5
R12	29.6	0.8	0.4	3.8	1.3	0.9	1.6
R14	26.4	0.9	0.2	5.9	0.7	0.6	2.0
Tout réflecteur	44.6	0.01	53.7	0.01	10.8	1.6	0.03

Nous pouvons constater que la dose neutron est minoritaire partout sauf dans le combustible. Ce sont les mêmes constatations que dans le cas homogène.

Ces calculs confirment les résultats observés lors de l'interprétation des mesures par TLD. La dose déposée dans le réflecteur est plus élevée dans la configuration « PERLE trou d'eau » que dans la configuration « PERLE homogène ». Cet effet est principalement dû à la composante  $\gamma$  prompt de la dose. Nous avons indiqué dans le Tableau VII-24, la différence des doses prompt déposées dans le réflecteur dans les deux configurations. C1 correspond à la dose prompt calculée dans la configuration « PERLE homogène » et C2 à celle calculée dans la configuration « PERLE trou d'eau ».

**Tableau VII-23 Comparaison des doses promptes calculées dans les deux configurations du programme expérimental PERLE**

Position du calcul	C1/C2-1 [%]
R2	-13.3
R4	-27.1
R6	-36.0
R8	-41.3
R10	-42.8
R12	-36.6
R14	-17.7
Tout réflecteur	-15.3

La dose calculée dans le réflecteur de la configuration « PERLE homogène » est très inférieure à la dose déposée dans la configuration « PERLE trou d'eau ». Cette différence peut atteindre plus de 40% de la dose déposée localement. Sur l'ensemble du réflecteur, elle est d'environ 15%.

Dans les réacteurs de troisième génération, le refroidissement du réflecteur est assuré par ces canaux d'eau. Ceux-ci ont donc deux effets contradictoires. Ils évacuent la chaleur mais en même temps contribuent à en produire plus.

### **VII.5 Réévaluation de la dose photon prompt avec les nouvelles évaluations du fer**

Nous avons effectué un nouveau calcul de l'énergie déposée dans le réflecteur en utilisant les nouvelles évaluations des isotopes du fer proposées dans le chapitre 5. Le Tableau VII-24 contient les résultats obtenus avec la nouvelle et l'ancienne évaluation.

**Tableau VII-24 Comparaison des calculs d'énergie déposée par les photons prompts avec les évaluations du fer dans la bibliothèque JEFF-3.1.1 et les nouvelles évaluations**

Position du calcul	Ancienne évaluation		Nouvelle évaluation		Différence [%]
	Dose $\gamma$ [mGy]	$\sigma$ [%]	Dose $\gamma$ [mGy]	$\sigma$ [%]	
Centre cœur en acier	620	0.3	618	0.3	-0.3
Côté cœur en acier	356	0.4	357	0.4	0.2
R2	164	0.1	165	0.1	0.9
R4	83.3	0.2	84.4	0.2	1.3
R6	48.8	0.2	49.5	0.2	1.5
R8	31.1	0.3	31.5	0.3	1.5
R10	21.9	0.3	22.4	0.3	2.3
R12	18.7	0.4	19.2	0.4	2.3
R14	21.8	0.3	22.1	0.4	-0.5
Tout réflecteur	37.8	<0.01	38.2	0.01	1.14

Dans la zone fissile, l'effet des nouvelles évaluations est négligeable. La plupart des photons déposant leurs énergies proviennent de la fission de  $^{235}\text{U}$  ou de la capture radiative de  $^{238}\text{U}$ . Dans le réflecteur, l'effet global des nouvelles évaluations est une augmentation de la dose totale déposée dans le réflecteur de 1.14%. A l'exception de la position R14, cette augmentation est d'autant plus importante que l'on s'éloigne de la zone fissile. Elle atteint 2.3% au niveau des positions R10 et R12. En position R14, l'effet des nouvelles évaluations s'annule. Les photons créés par la capture du  $^{56}\text{Fe}$  sont en moyenne plus énergétiques dans la nouvelle évaluation et ont ainsi tendance à sortir plus facilement du réflecteur pour aller déposer leurs énergies dans le modérateur.

Les incertitudes sur les mesures effectuées avec les TLD sont de l'ordre de 5 à 6%. Par conséquent, l'effet des nouvelles évaluations est trop faible pour que l'on puisse les qualifier avec les mesures par TLD.

## **VII.6 Conclusions sur la qualification de TRIPOLI4 et de la bibliothèque JEFF-3.1.1**

Les résultats obtenus dans ce chapitre sont très concluants. Nous avons pu montrer qu'en utilisant une méthodologie de calcul appropriée, le code TRIPOLI4 permet de reproduire les mesures d'échauffements photoniques dans le réflecteur en acier à l'incertitude expérimentale près en utilisant la bibliothèque de données nucléaires JEFF-3.1.1.

Le calcul de l'échauffement dans les matériaux entourant les TLD dans les deux configurations « PERLE homogène » et « PERLE trou d'eau » montre que l'ajout de canaux d'eau pour évacuer la chaleur créée par les dépôts d'énergie  $\gamma$  dans le réflecteur induit une augmentation de l'intensité de ces mêmes sources de chaleur. L'eau modère les neutrons dans le réflecteur et favorise ainsi la capture radiative thermique dans l'acier qui génère des photons de hautes énergies.

Nous avons effectué les calculs d'échauffements dans les matériaux en utilisant les nouvelles évaluations de données nucléaires du fer. La méthode de production de ces

nouvelles évaluations est détaillée dans le chapitre 5. La dose déposée par les photons a augmenté mais reste inférieure à l'incertitude expérimentale des mesures par TLD. Par conséquent, il n'est pas possible de conclure sur les améliorations induites par ces nouvelles évaluations.

## Chapitre VIII Validation et qualification du code APOLLO2

Dans le chapitre précédent, nous avons qualifié le code de transport TRIPOLI4 avec la bibliothèque JEFF-3.1.1 pour les calculs d'échauffements  $\gamma$ . A présent, nous qualifions le code déterministe APOLLO2. Pour cela, nous effectuons une phase préliminaire de validation de calcul APOLLO2 par rapport à TRIPOLI4 puis nous interprétons les mesures PERLE en configuration « homogène ». Ce chapitre est en partie tiré de la référence [91].

### VIII.1 Outils nécessaires au calcul de l'échauffement $\gamma$ avec APOLLO2

#### VIII.1.i Données nucléaires et atomiques utilisées

APOLLO2 étant un code de transport de particule (neutron et photon uniquement), il est nécessaire de posséder une base de données contenant les sections efficaces d'interaction particule-matière **multigroupes**. Toutes ces données sont issues de bibliothèques internationales recommandées. Elles ont été mises en forme pour les codes de transport de manière cohérente par la chaîne de traitement GALILEE-V0.2.0[90].

Un transport couplé neutron-photon consiste à résoudre l'équation de Boltzmann pour chaque particule. Le premier est un transport critique (reproduction par le terme de fission), le second un transport non critique à source imposée (propagation simple).

Les données nucléaires (sections de transport de neutron et sources de photon) et atomiques (sections de transport de photon) sont contenues dans trois 'APOLIB' regroupant les quantités physiques suivantes :

- les sections neutron-noyaux,
- les sources de photons,
- les sections photo-atomiques.

##### VIII.1.i.a Bibliothèque de transport neutronique : sections efficaces nucléaires

La bibliothèque de transport neutronique est la CEA2005.V4.1.1 qui a été processée de manière cohérente pour TRIPOLI4 et pour APOLLO2. De nombreux retours de qualification ont été réalisés, notamment sur :

- la bonne qualité des sections efficaces inélastiques du  $^{56}\text{Fe}$ , qui par la suite, constitueront une des sources de photons dans le baffle lourd de l'expérience PERLE,
- la bonne prédiction des puissances locales dans le combustible et du gain réflecteur lourd assurant *a priori* la bonne qualité du terme source photon dans les éléments combustibles et structures de PERLE.

La résolution de l'équation du transport neutron ne nécessite pas un niveau de détail tel que la différenciation de chaque seuil de diffusion inélastique ni même la distinction entre élastique ou inélastique. Ainsi, la section dite de transfert regroupe les chocs élastique et inélastique. De la même manière, la section de capture neutronique regroupe toutes les réactions sans neutron en voie de sortie :  $(n,\gamma)+(n,\alpha)+(n,p)\dots$

Les bibliothèques regroupant les données isotopiques, sections et taux effectifs et leur description en tables de probabilités sont : CEA2005.G281.V4.1.1.DIRECT et CEA2005.V4.1.UNIVSH.TP[92].

L'utilisation des données effectives (autoprotection) a fait l'objet de nombreuses validations. Ainsi, les schémas de calcul utilisés seront calqués sur les schémas

recommandés avec la contrainte que la bibliothèque de sections de production photon nécessite des taux de réactions neutroniques à 281 groupes. Le schéma SHEM-MOC[8] est donc retenu.

#### VIII.1.i.b Bibliothèque de production photonique

La production gamma prompte telle que stockée dans les fichiers « ENDF/General Purpose » dépend uniquement de l'énergie incidente du neutron et de la réaction considérée. Indépendamment de tout calcul, pour un noyau particulier, à chaque groupe du maillage neutron, correspondra donc un spectre de production gamma. C'est ce que l'on appelle la matrice de production  $\gamma$ . Ses dimensions sont : nombre de groupes neutron X nombre de groupes photon. Le spectre photonique final, est obtenu en multipliant cette matrice par le vecteur spectre de flux neutron. Dans notre cas, on considèrera la bibliothèque CEA2005.V4.1.1\_NGAM\_G281\_GG94.XSM[93], soit un maillage historique pour les photons à 94 groupes (csewg structure) pour les photons pour une grille d'entrée à 281 groupes (maillage SHEM) pour les neutrons.

Cette bibliothèque est basée sur les évaluations de données nucléaires JEFF-3.1.1/GP[10] et en particulier les parties MF6-12-13-14 et 15 décrivant les spectres et multiplicités des particules secondaires (photon, neutron, électron...) tabulés selon l'énergie incidente du neutron. La multiplicité photonique est une fonction monotone de l'énergie du neutron incident et ne nécessite donc pas de traitement du type autoprotection.

L'identification de chaque isotope produisant des photons s'effectue par son couple nombre de charges et nombre de masses (Z, A). Pour chaque isotope, on doit différencier les sections de production par fission, capture radiative, capture du genre  $(n, \alpha\gamma)$  et diffusions inélastiques. Une matrice de production de taille 281x94 est ainsi constituée pour chaque isotope.

Pour la bibliothèque d'APOLLO2, plusieurs hypothèses sont effectuées pour estimer la composante retardée de production gamma par fission induite :

- Le spectre de photons retardés est le même que le spectre de photons prompts. En réalité, il est plus doux.
- La multiplicité est constante selon l'énergie du neutron incident.
- Ces deux hypothèses permettent de déduire la valeur de la multiplicité retardée :

$$\begin{aligned}\overline{E}_{\gamma, \text{retardée}} &= \nu_{\gamma, \text{retardé}} \times \int \chi_{\gamma}(E_{\gamma}) \cdot E_{\gamma} \cdot dE_{\gamma} = \nu_{\gamma, \text{retardé}} \times \overline{E}_{\gamma} \\ \overline{E}_{\gamma, \text{prompt}} &= \nu_{\gamma, \text{prompt}} \times \int \chi_{\gamma}(E_{\gamma}) \cdot E_{\gamma} \cdot dE_{\gamma} = \nu_{\gamma, \text{prompt}} \times \overline{E}_{\gamma}\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \nu_{\gamma, \text{retardé}} = \frac{E_{\gamma, \text{retardée}}}{E_{\gamma, \text{prompte}}} \nu_{\gamma, \text{prompt}}$$

Ces deux valeurs sont contenues en MF1-MT458 dans les bibliothèques de données nucléaire.

Finalement, ces productions retardées ne sont absolument pas basées sur les données de désintégration radioactive ENDF/Decay Data, rendements de fission, etc... tels que nécessaires pour un calcul rigoureux d'évolution de Bateman. Pour les calculs dans lesquels l'équilibre des produits de fission n'est pas atteint, il n'est même pas possible de réduire la part de la composante retardée afin d'être cohérent énergétiquement.

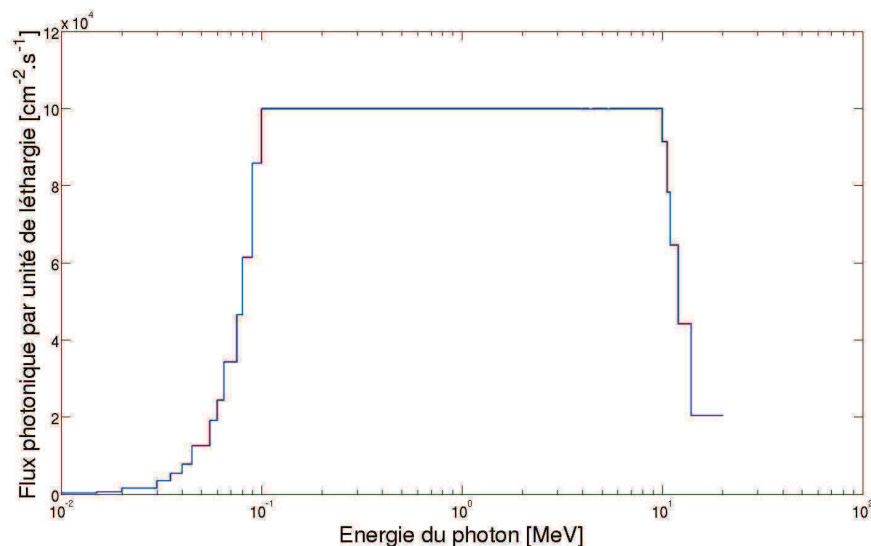
Les données de relaxation atomique ne sont pas processées. La source de rayons X, l'énergie des électrons Auger (tout comme celle des électrons de conversion) sont donc

négligées. L'énergie qu'ils devraient normalement transporter est donc déposée au moment de l'impact du photon « ionisant » avec le cortège électronique. Cette approximation n'est pas trop forte sachant que les photons X ont en général une énergie si faible qu'ils ne se transportent quasiment pas (en comparaison avec les photons  $\gamma$ ).

#### VIII.1.i.c Bibliothèque de transport photonique : sections efficaces photo-atomiques

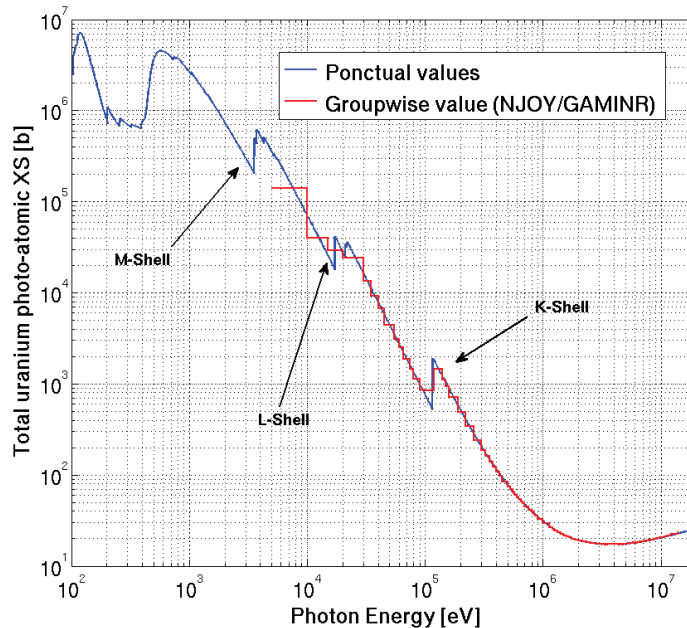
Par définition, une ligne isotopique ( $Z=\text{constante}$ ) contient un unique jeu de sections photo-atomiques. Pour des raisons de liens informatiques et de simplicité entre les objets des bibliothèques précédentes, les sections photo-atomiques sont dupliquées pour  $^{235}\text{U}$  et  $^{238}\text{U}$  par exemple.

La bibliothèque CEA2005.V4.1.1\_GAM\_GG94.DIRECT[94] est basée sur l'évaluation EPDL97[12]. Les sections ponctuelles selon l'énergie photon sont reconstruites (GALILEE-V0.2.2/NJOY99.159/RECONR) puis mises en groupes (GALILEE-V0.2.0/NJOY99.159/GAMINR) avec le spectre de pondération dit « iwt3 =  $1/E_\gamma + \text{rolloffs}$  (tombant) ». Ce spectre est représenté sur la Figure VIII-1.



**Figure VIII-1 Flux photonique de pondération pour la définition des sections efficaces multigroupes de transport photonique**





**Figure VIII-2 Sections photoatomiques ponctuelles et mises en groupes de l'uranium**

Les sections efficaces multigroupes à traiter par le transport APOLLO2 sont condensées en :

- absorption photonique soit l'effet photo-électrique,
- diffusion totale incluant les parties cohérente et incohérente,
- excès : « création de paires ».

Dans la bibliothèque de transport gamma utilisée, la section de création de paire ( $\gamma, e^+$ ) est immédiatement suivie de l'annihilation de la paire en 2 photons ( $e^+, 2\gamma$ ). Le transport des particules chargées étant négligé, la création de paire se résume à une réaction ( $\gamma, 2\gamma$ ), soit à une section d'excès photonique.

Les sections de transfert multigroupes sont développées selon les polynômes de Legendre à l'ordre P5 pour rendre compte de la forme extrêmement piquée vers l'avant des sections de diffusion, notamment à haute énergie. Un gamma très énergétique perd finalement très peu d'énergie dans le milieu et est donc très peu dévié.

### VIII.1.ii Schéma de calcul déterministe de transport photonique

Le calcul APOLLO2 du flux neutron est réalisé avec le schéma de référence SHEM-MOC à fuites nulles pour être comparé facilement à TRIPOLI4 en mode neutron+photon.

Le terme source gamma est calculé dans chaque maille à partir des taux de réactions isotopiques. Le transport photon est réalisé à 94 groupes avec le solveur MOC et un développement à l'ordre P5 des diffusions sur la même géométrie que le calcul neutron précédent.

Après la résolution de l'équation du transport, l'édition des taux de réaction photonique nous donne le KERMA  $\gamma$  déposé dans chaque maille. L'enchaînement détaillé des modules utilisés avec APOLLO2 pour le calcul du KERMA photonique est détaillé en annexe C.

## VIII.2 VALIDATION D'APOLLO2.8-3

### VIII.2.i Méthodologie de validation : source et transport photonique

La validation d'APOLLO2.8-3 par rapport à TRIPOLI4.8 est réalisée par étape :

- validation du transport neutron à fuite nulle par comparaison des  $k_{\text{eff}}=k_{\infty}$  et des flux neutroniques,
- validation du terme source  $\gamma$  prompt (multiplicité et spectre),
- validation du flux  $\gamma$  prompt (niveau absolu et spectre),
- validation de l'énergie  $\gamma$  prompt déposée dans les matériaux d'intérêt en MeV (ou de la puissance spécifique en W/g).

Valider les termes spectraux consiste à montrer que pour deux spectres  $\overrightarrow{\chi_{A2}}(E)$  et  $\overrightarrow{\chi_{T4}}(E)$ , calculés respectivement avec APOLLO2 et TRIPOLI4, on vérifie l'égalité :

$$\forall E, \overrightarrow{\chi_{A2}}(E) \approx \overrightarrow{\chi_{T4}}(E)$$

Nous avons divisé la validation en trois étapes :

- La première étape consiste à vérifier la colinéarité des deux spectres. Pour cela, nous calculons le coefficient de corrélation linéaire  $\rho = \text{cor}[\tilde{\chi}_{T4}(E), \tilde{\chi}_{A2}(E)]$  entre les deux spectres. Si celui-ci est supérieur à 0.99, alors l'hypothèse de colinéarité est considérée comme vérifiée. Il est possible d'utiliser l'angle  $\alpha = \arccos(\rho)$ . Dans ce cas, l'hypothèse de colinéarité est vérifiée si celui-ci est inférieur à  $10^\circ$ .
- La deuxième étape consiste à calculer les coefficients a et b de la droite de régression linéaire entre les deux spectres dont l'expression est:  $\tilde{\chi}_{A2}(E) = a \cdot \tilde{\chi}_{T4}(E) + b$ . Si  $b < 10^{-4}$ , alors la valeur a-1 peut-être interprétée comme le biais moyen groupe par groupe entre les spectres APOLLO2 et TRIPOLI4. Si  $a-1 < 0$ , cela signifie donc que le spectre APOLLO2 sous-estime en moyenne celui de TRIPOLI4.
- La troisième étape consiste à calculer le biais entre APOLLO2 et TRIPOLI4 sur les spectres intégrés, soient les multiplicités totales, niveaux de flux ou KERMA.

Deux géométries sont considérées :

- Une cellule simple en milieu infini,
- La géométrie d'une expérience critique menée sur la maquette critique EOLE nommée PERLE.

### VIII.2.ii Cas cellule en milieu infini

On considère ici une cellule REP- $\text{UO}_2$  en condition de fonctionnement à chaud et dont le combustible est enrichi à 3.7% en  $^{235}\text{U}$ .

#### VIII.2.ii.a Validation des spectres calculés par APOLLO2

Les calculs de validation TRIPOLI4 et APOLLO2 sur un cas cellule ont été effectués en utilisant des crayons de combustible neuf. Cette approche permet de s'affranchir des lacunes sur les données nucléaires des produits de fission. Cette géométrie a été étudiée de nombreuses fois, notamment dans la référence [15]. Par conséquent, nous n'avons pas validé de nouveau le calcul neutronique d'APOLLO2.

Les tableaux de validation suivants sont donnés pour 1 neutron source dans les deux codes et les sources retardées sont ignorées :

**Tableau VIII-1 Coefficients de corrélation des grandeurs photoniques**

	Source		Flux		KERMA	
	$\rho$	$\alpha$ (°)	$\rho$	$\alpha$ (°)	$\rho$	$\alpha$ (°)
<b>Modérateur</b>	1.0000	0.51	0.9999	0.81	0.9999	0.85
<b>Gaine</b>	0.9998	1.09	0.9999	0.63	0.9998	1.17
<b>Couronne 4 UOx</b>	0.9940	6.23	0.9999	0.96	0.9997	1.47
<b>Couronne 3 UOx</b>	0.9923	7.11	0.9999	0.85	0.9998	1.27
<b>Couronne 2 UOx</b>	0.9912	7.58	0.9999	0.85	0.9998	1.26
<b>Couronne 1 UOx</b>	0.9899	8.16	0.9999	0.77	0.9998	1.12

Les incertitudes liées à la convergence du calcul TRIPOLI4<sup>43</sup> sont très faibles (<<1% dans les groupes d'énergie importants). Par conséquent, l'incertitude sur le coefficient de corrélation se situe au niveau du 5<sup>ème</sup> chiffre après la virgule. A l'exception de la source dans la première couronne combustible, toutes les réponses APOLLO2 et TRIPOLI4 ont des coefficients de corrélation supérieurs à 0.99. Les coefficients de corrélation des sources sont plus éloignés de 1 à cause du pic de capture de l'<sup>238</sup>U d'énergie 42.5 keV qui a été traité dans deux groupes voisins dans les bibliothèques à 94 groupes utilisées par APOLLO2 et TRIPOLI4. Ce problème n'est plus visible sur le flux et le KERMA car dans le combustible, les photons dont l'énergie est inférieure à 100 keV sont absorbés localement après leurs créations.

Le calcul des coefficients de corrélations a permis de montrer que les spectres APOLLO2 et TRIPOLI4 étaient liés entre eux par une relation affine. Il convient à présent de calculer le coefficient directeur et l'ordonnée à l'origine de cette droite par la méthode des moindres carrés. Les résultats sont donnés dans le Tableau VIII-2.

**Tableau VIII-2 Coefficients directeurs de la droite de régression linéaire**

	Source		Flux		KERMA	
	a-1 [%]	10 <sup>5</sup> b [cm <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ]	a-1 [%]	10 <sup>5</sup> b [cm <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ]	a-1 [%]	10 <sup>5</sup> b [MeV.cm <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]
<b>Modérateur</b>	-0.31±0.11	53.5±(<0.1)	-1.89±0.06	7.3±5.3	-1.67±0.14	1.5±1.3
<b>Gaine</b>	1.16±0.23	31.0±0.2	-3.14±0.05	3.9±0.9	-2.95±0.14	2.6±0.6
<b>Couronne 4 UOx</b>	-2.14±0.17	14.2±0.5	-1.51±0.06	0.9±0.2	-1.61±0.14	1.6±0.4
<b>Couronne 3 UOx</b>	-2.86±0.11	4.4±0.8	-1.64±0.05	1.9±0.4	-1.84±0.09	4.2±0.7
<b>Couronne 2 UOx</b>	-3.55±0.08	2.5±1.1	-1.74±0.05	2.3±0.9	-1.75±0.06	6.9±1.0
<b>Couronne 1 UOx</b>	-4.22±0.06	1.9±1.3	-1.89±0.05	3.0±1.4	-1.84±0.05	6.7±1.3

A l'exception des sources dans le modérateur et la gaine qui sont presque inexistantes, les ordonnées à l'origine sont suffisamment faibles par rapport au coefficient directeur pour que celui-ci soit interprété comme un biais moyen groupe par groupe entre APOLLO2 et TRIPOLI4. Ainsi, APOLLO2 a tendance à sous-estimer la multiplicité des sources  $\gamma$  dans le combustible de 2.1 à 4.2% en allant de la couronne externe à la couronne centrale. De plus, on observe que ce spectre est plus doux que dans TRIPOLI4. Cette sous-

<sup>43</sup> <0.2% dans les groupes d'énergie où les scores sont élevés

estimation est conservée dans les résultats des calculs du flux et du KERMA, bien qu'elle soit moins importante avec des biais allant de -1.6 à -1.9% environ.

La sous-estimation de la source avait déjà été constatée par Nicolas Huot dans un rapport écrit en 2009[95]. Ce rapport montrait que dans un environnement crayon MOx infini, la multiplicité des sources produites par  $^{238}\text{U}$  était sous-estimée d'environ 2% et que l'énergie émise totale l'était d'environ 3%. Les sous-estimations observées dans notre cas sont probablement dues aux mêmes erreurs.

A présent, il convient d'estimer les biais entre APOLLO2 et TRIPOLI4 sur les spectres intégrés en énergie, c'est-à-dire la multiplicité gamma, le niveau de flux et le KERMA total. Ces biais sont ceux qui seront retenus pour la validation du code APOLLO2 par rapport à TRIPOLI4. Toutes les valeurs sont données dans les tableaux ci-dessous.

**Tableau VIII-3 Multiplicités des sources photons calculées avec APOLLO2 et TRIPOLI4**

	APOLLO2.8-3 [cm <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]	TRIPOLI4.8 [cm <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]	ECARTS (A2/T4-1) [%]
<b>Modérateur</b>	0.72	0.70±0.001	1.9±0.11
<b>Gaine</b>	4.29	4.09±0.01	5.0±0.16
<b>Couronne 4 UOx</b>	115.03	116.33±0.15	-1.1±0.13
<b>Couronne 3 UOx</b>	99.86	99.41±0.08	-1.6±0.08
<b>Couronne 2 UOx</b>	90.94	93.09±0.06	-2.0±0.06
<b>Couronne 1 UOx</b>	85.50	87.73±0.04	-2.5±0.05

**Tableau VIII-4 Niveaux de flux calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4**

	APOLLO2.8-3 [cm <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ]	TRIPOLI4.8 [cm <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ]	ECARTS (A2/T4-1) [%]
<b>Modérateur</b>	119.48	121.77±0.06	-1.8±0.05
<b>Gaine</b>	118.61	120.97±0.06	-2.0±0.05
<b>Couronne 4 UOx</b>	119.15	120.55±0.06	-1.3±0.05
<b>Couronne 3 UOx</b>	118.03	119.74±0.06	-1.5±0.05
<b>Couronne 2 UOx</b>	117.10	118.98±0.06	-1.6±0.05
<b>Couronne 1 UOx</b>	116.34	118.40±0.06	-1.8±0.05

**Tableau VIII-5 KERMA total calculé avec APOLLO2 et TRIPOLI4**

	APOLLO2.8-3 [MeV.cm <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]	TRIPOLI4.8 [MeV.cm <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]	ECARTS (A2/T4-1) [%]
<b>Modérateur</b>	4.09	4.15±0.005	-1.4±0.13
<b>Gaine</b>	25.26	25.63±0.03	-1.5±0.12
<b>Couronne 4 UOx</b>	81.79	82.55±0.12	-1.0±0.14
<b>Couronne 3 UOx</b>	79.45	80.44±0.06	-1.3±0.08
<b>Couronne 2 UOx</b>	77.50	78.49±0.05	-1.3±0.06
<b>Couronne 1 UOx</b>	76.18	77.35±0.05	-1.6±0.06

On peut constater que le niveau de flux est à peu près identique dans tous les volumes mais que le KERMA total est déposé à 84% dans le combustible. Les biais réels entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 sont à peu près identiques aux biais obtenus lors du calcul des coefficients de régression linéaire. Les sources sont sous-estimées dans le combustible et surestimées ailleurs. Cependant, comme plus de 97% des photons émis proviennent du combustible, le flux et le KERMA  $\gamma$  sont sous-estimés par APOLLO2 dans l'ensemble des volumes de la cellule entre -2 et -1%.

#### VIII.2.ii.b Validation du transport $\gamma$ à source imposée

Afin de valider uniquement le transport déterministe, et d'éliminer le biais lié aux sources gamma, un calcul TRIPOLI4 de transport uniquement photonique a été effectué en prenant comme sources celles calculées par APOLLO2. Les résultats sont présentés dans les tableaux ci-dessous :

**Tableau VIII-6 Coefficients de corrélation des réponses photonique à sources multigroupes identiques**

	Flux		KERMA	
	$\rho$	$\alpha$ (°)	$\rho$	$\alpha$ (°)
<b>Modérateur</b>	0.9999	0.63	1.0000	0.01
<b>Gaine</b>	1.0000	0.57	1.0000	0.01
<b>Couronne 4 UOx</b>	1.0000	0.36	1.0000	0.01
<b>Couronne 3 UOx</b>	1.0000	0.26	1.0000	<0.01
<b>Couronne 2 UOx</b>	1.0000	<0.00	1.0000	<0.01
<b>Couronne 1 UOx</b>	1.0000	0.36	1.0000	0.01

**Tableau VIII-7 Coefficients directeurs de la droite de régression linéaire à sources multigroupes identiques**

	Flux		KERMA	
	a-1 [%]	$10^5b$ [cm <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ]	a-1 [%]	$10^5b$ [MeV.cm <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]
<b>Modérateur</b>	0.51±0.008	-6.60±0.37	0.23±0.02	0.69±0.09
<b>Gaine</b>	0.30±0.008	1.08±0.14	-0.36±0.02	2.55±0.10
<b>Couronne 4 UOx</b>	1.00±0.009	0.35±0.02	1.13±0.02	0.22±0.07
<b>Couronne 3 UOx</b>	0.89±0.009	0.49±0.07	0.94±0.02	0.67±0.12
<b>Couronne 2 UOx</b>	1.01±0.009	1.38±0.13	1.04±0.01	2.23±0.16
<b>Couronne 1 UOx</b>	-1.02±0.004	-10.92±0.22	-1.16±0.01	-5.09±0.20

Les spectres calculés par APOLLO2 et TRIPOLI4 sont presque identiques d'après les coefficients de corrélations. Les coefficients directeurs associés à la première couronne combustible sont inférieurs à 1 tandis que ceux associés aux trois autres couronnes sont supérieurs à 1. Il est possible que cet effet soit dû au découpage spatial du combustible sachant que pour les calculs d'auto-absorption gamma, le découpage des pastilles combustibles se fait habituellement sur 20 couronnes.

**Tableau VIII-8 Niveaux de flux calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 à sources multigroupes identiques**

	APOLLO2.8-3 [cm <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ]	TRIPOLI4.8 [cm <sup>-2</sup> .s <sup>-1</sup> ]	ECARTS (A2/T4-1) [%]
<b>Modérateur</b>	119.48	118.92±0.004	<b>+0.47±(&lt;0.01)</b>
<b>Gaine</b>	118.61	118.21±0.012	<b>+0.33±0.01</b>
<b>Couronne 4 UOx</b>	119.15	117.87±0.01	<b>+1.09±0.01</b>
<b>Couronne 3 UOx</b>	118.03	116.94±0.01	<b>+0.93±0.01</b>
<b>Couronne 2 UOx</b>	117.100	115.87±0.01	<b>+1.07±0.01</b>
<b>Couronne 1 UOx</b>	116.34	117.86±0.01	<b>-1.29±0.01</b>

**Tableau VIII-9 KERMA calculé avec APOLLO2 et TRIPOLI4 à sources multigroupes identiques**

	APOLLO2.8-3 [MeV.cm <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]	TRIPOLI4.8 [MeV.cm <sup>-3</sup> .s <sup>-1</sup> ]	ECARTS (A2/T4-1) [%]
<b>Modérateur</b>	4.09	4.08±0.001	<b>+0.37±0.02</b>
<b>Gaine</b>	25.26	25.23±0.005	<b>+0.12±0.02</b>
<b>Couronne 4 UOx</b>	81.79	80.81±0.016	<b>+1.21±0.02</b>
<b>Couronne 3 UOx</b>	79.45	78.65±0.008	<b>+1.02±0.01</b>
<b>Couronne 2 UOx</b>	77.50	76.60±0.008	<b>+1.18±0.01</b>
<b>Couronne 1 UOx</b>	76.18	77.23±0.008	<b>-1.35±0.01</b>

Les écarts entre APOLLO2 et TRIPOLI4 sont très similaires pour le calcul du flux et du KERMA. Le biais lié au transport photonique multigroupe est presque nul dans la gaine et le réflecteur. Dans les 3 couronnes combustibles externes, le biais est de l'ordre de +1%. Dans la couronne centrale, il est de -1.3%.

#### VIII.2.ii.c Conclusion intermédiaire

Nous pouvons déduire de cette partie plusieurs informations :

- Un biais de -2% sur le calcul des sources a été détecté. Il est certainement lié à la bibliothèque de production gamma traitée pour APOLLO2.
- A source photon imposée, le calcul du flux et du KERMA photon avec APOLLO2 a été validé à 1 % près par rapport à TRIPOLI4.
- Les erreurs dans la bibliothèque de production photonique traitée pour APOLLO2 accentuent ces biais à 2%.

#### VIII.2.iii Cas PERLE en 2 dimensions radiales

Nous reprenons le schéma de validation utilisé précédemment pour le cas cellule. Pour pouvoir comparer les résultats, le calcul a été effectué avec un B<sup>2</sup> nul pour APOLLO2 et avec des conditions de réflexions axiales dans TRIPOLI4.

Les k<sub>eff</sub> obtenus sont donnés dans le Tableau VIII-10. La différence entre APOLLO2 et TRIPOLI4 est d'environ 100 pcm. Cela induit une différence maximale de 0.1% sur les

taux de fission et de capture et par conséquent sur les principales sources photoniques dans le cœur.

**Tableau VIII-10  $k_{\text{eff}}$  calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4**

APOLLO2	TRIPOLI4
1.05609	$1.05501 \pm 5.10^{-5}$

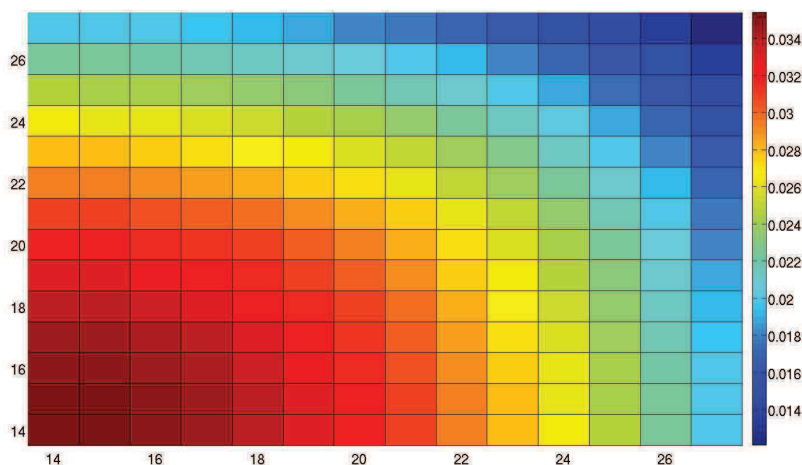
#### VIII.2.iii.a Validation du flux neutronique dans le combustible

Nous avons calculé le flux neutronique, le flux photonique, et le KERMA photonique dans chaque pastille de combustible et dans chaque trou d'eau de la zone fissile du cœur PERLE. Dans la géométrie 8<sup>ème</sup> définie pour APOLLO2, cela représente 105 points de calcul homogénéisant 2916 mailles spatiales élémentaires.

Il n'est pas possible d'éditer la source photon sur un maillage spatial homogénéisé avec APOLLO2. La source photon ne peut être donnée qu'individuellement pour chacune des 2916 mailles spatiales élémentaires du calcul. Par conséquent, comme les sources photoniques ont déjà été en partie validées dans le cas cellule précédent, nous ne les étudierons pas dans la zone fissile du cœur PERLE.

#### **Calcul du niveau de flux neutronique avec TRIPOLI4**

La Figure VIII-3 représente la nappe de flux calculée avec TRIPOLI4. L'abscisse et l'ordonnée représente la position dans le réseau de crayons. La position 14-14 est la position centrale et la position 27-27 est un coin. Afin de rendre la figure plus claire, nous avons représenté un quart de cœur au lieu d'un 8<sup>ème</sup> de cœur (géométrie APOLLO2). Pour cela, nous avons simplement symétrisé les résultats par rapport à la diagonale du cœur. Le nombre de points de calcul représenté n'est donc plus de 105 mais de 196.



**Figure VIII-3 Niveau de flux neutronique dans le combustible calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ]**

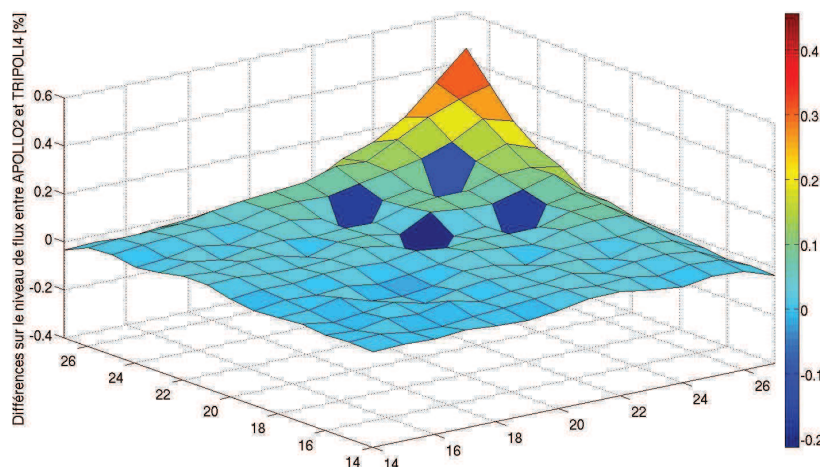
Nous constatons assez logiquement que le point où le niveau de flux est le plus important se situe au centre du cœur en position 14-14 tandis que le plus faible est en position 27-27 entre les deux baffles en acier entourant la zone fissile. Le facteur de forme  $\phi_{\text{max}}/\langle\phi\rangle$  est de 1.500.

#### **Validation du calcul du flux neutronique APOLLO2 par rapport à TRIPOLI4**

Les niveaux de flux calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 sont très proches. La différence maximale est de 0.45% et est observée en position 27-27. Ailleurs, elle est



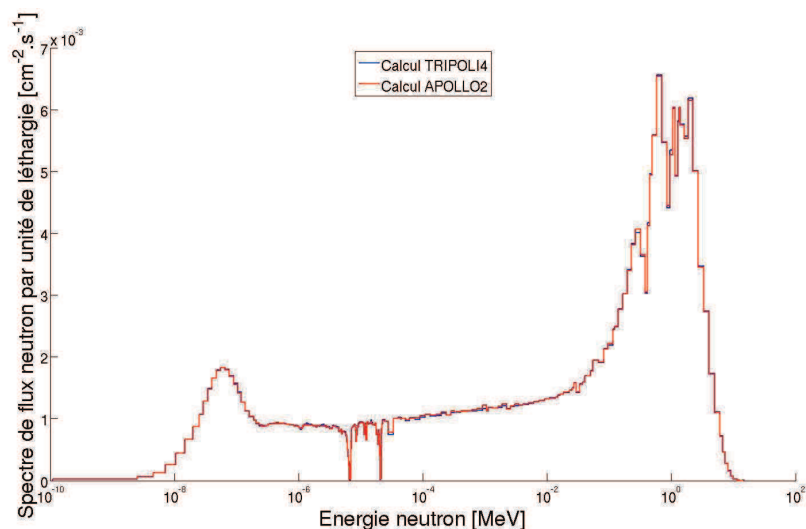
presque partout inférieure à 0.1%. Cette différence a été représentée sur la Figure VIII-4 dans le même plan de coordonnées que le niveau de flux.



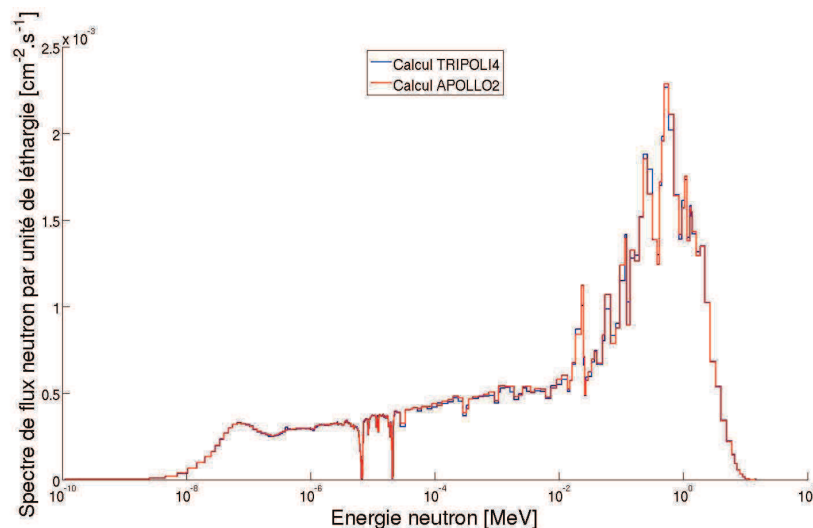
**Figure VIII-4 Différences des niveaux de flux neutroniques dans le combustible entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]**

Les spectres de flux neutroniques sont quasiment identiques entre APOLLO2 et TRIPOLI4 avec des coefficients de corrélations presque partout supérieurs à 0.9999 sauf autour de la position 27-27 où celui-ci baisse et atteint une valeur minimale de 0.9991. Les coefficients directeurs de la droite de régression linéaire confirment les résultats observés sur la Figure VIII-4 en oscillant entre 0.9916 et 1.0004 soient des différences entre APOLLO2 et TRIPOLI4 inférieures à 1%.

Nous avons tracé sur les Figure VIII-5 et Figure VIII-6 les spectres de flux calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 au centre (position 14-14) et dans le coin (position 27-27) de la zone fissile. Nous pouvons voir que la « décorrélation » observée dans le coin de la zone fissile est liée à la partie rapide du spectre neutronique d'énergie supérieure à 10 keV. Les différences entre APOLLO2 et TRIPOLI4 dans certains groupes d'énergie donnés peuvent alors atteindre 5%.



**Figure VIII-5 Comparaison des spectres de flux neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 dans le crayon central de la zone fissile (position 14-14)**



**Figure VIII-6 Comparaison des spectres de flux neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 dans le crayon situé dans le coin de la zone fissile (position 27-27)**

### ***Validation du flux neutronique et des sources photoniques dans le réflecteur***

Dans le calcul APOLLO2 8<sup>ème</sup> de cœur, nous avons homogénéisé les mailles spatiales élémentaires dans le réflecteur de sorte que l'édition des résultats s'effectuent dans 14X16 mailles spatiales carrées de dimension 1.32X1.32 cm<sup>2</sup>. Cette dimension correspond à la taille des cellules dans le réseau de crayon combustible. Ce découpage est visible sur la Figure VIII-7 dans le cas du cœur complet. Chaque carré coloré correspond à une maille spatiale dans laquelle nous calculons les flux neutronique, photonique et le KERMA photon. Nous n'avons pas effectué d'édérations dans les coins du réflecteur.

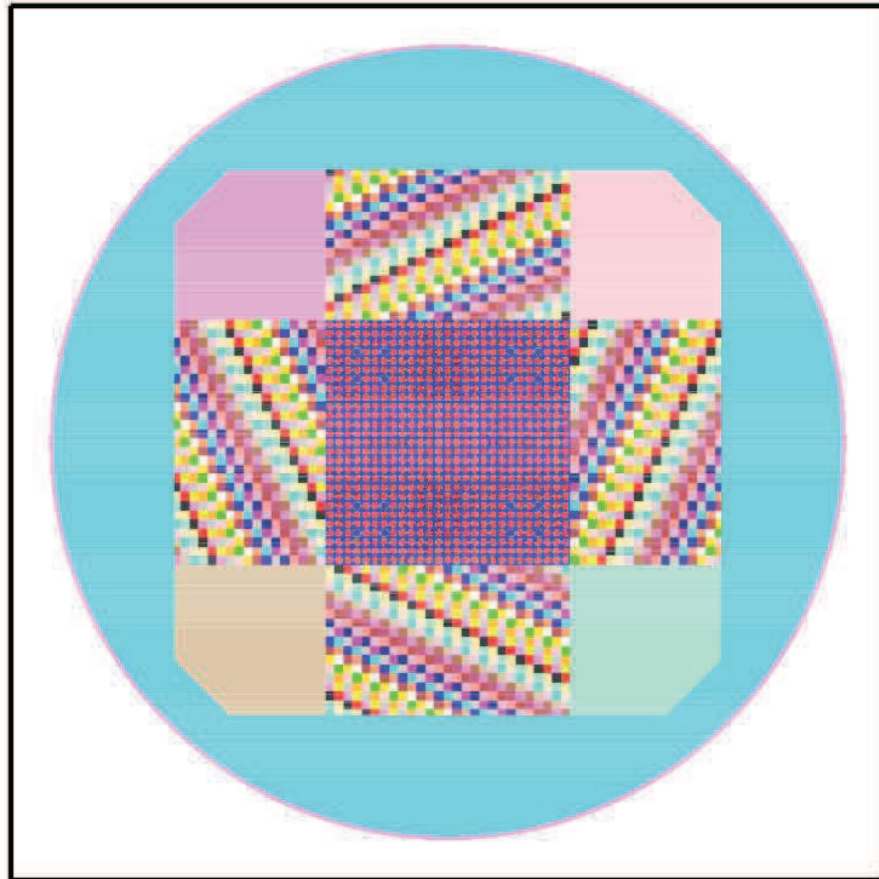


Figure VIII-7 Découpage spatial du réflecteur de PERLE pour la validation APOLLO2

#### **Calcul du niveau de flux neutronique avec TRIPOLI4**

La Figure VIII-8 représente le niveau de flux neutronique dans le réflecteur en acier dans un 8<sup>ème</sup> de cœur calculé avec TRIPOLI4. Les abscisses x et y représentent les pénétrations radiale et transversale dans le réflecteur. Nous pouvons voir que le niveau de flux neutronique varie presque d'un facteur 10 entre l'entrée et la sortie du réflecteur.

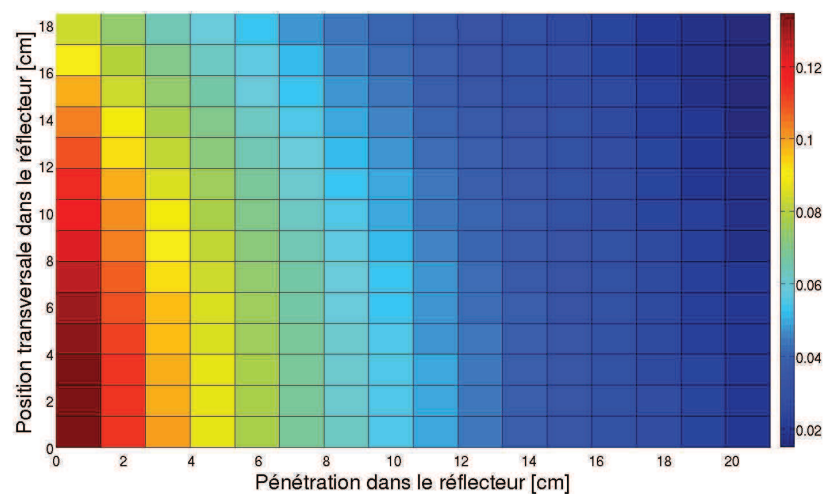
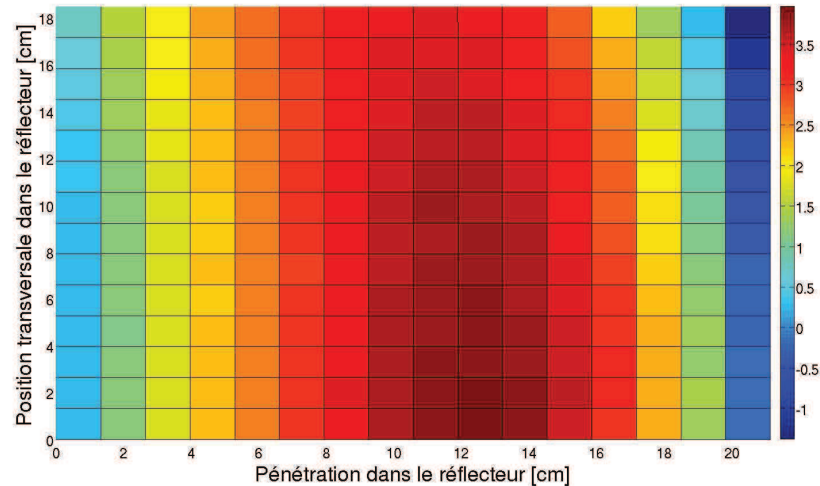


Figure VIII-8 Niveau de flux neutronique dans le réflecteur calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ]

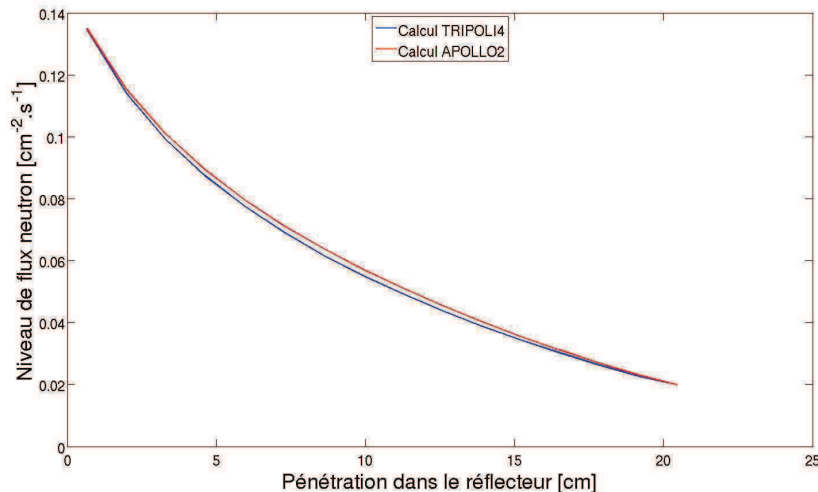
#### **Validation du niveau de flux calculé avec APOLLO2 par rapport à TRIPOLI4**

Nous avons tracé sur la Figure VIII-9 la différence de niveau de flux neutronique dans le réflecteur entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4. Le niveau de flux neutronique est très bien estimé à l'entrée du réflecteur. A mesure que la profondeur de pénétration augmente, APOLLO2 tend à surestimer de plus en plus le niveau de flux jusqu'à atteindre un maximum d'environ 4% à 13 cm.



**Figure VIII-9 Différences des niveaux de flux neutroniques dans le réflecteur entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]**

Toutefois, cette surestimation relative maximale est observée à un endroit où le flux neutronique est très atténué. Sur la Figure VIII-10, nous avons tracé le niveau de flux neutronique normalisé à un neutron calculé avec APOLLO2 et TRIPOLI4 sur la traverse centrale du réflecteur. Nous pouvons voir qu'au bout de 13 cm de pénétration, le niveau de flux a presque été divisé par 4 par rapport à celui calculé à l'entrée du réflecteur.



**Figure VIII-10 Niveau de flux neutronique sur la traverse centrale du réflecteur [ $\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ]**

### **Validation du spectre de flux neutronique**

Les coefficients de corrélation obtenus sont plus faibles que dans la zone fissile. Ils ont tendance à diminuer avec l'enfoncement dans le réflecteur. A la frontière avec la zone fissile, ils sont de l'ordre de 0.9980 tandis qu'au bout du réflecteur, ils ne sont plus que d'environ 0.9900.

Le coefficient directeur de la droite de régression linéaire oscille entre 1 (en entrée du réflecteur), jusqu'à atteindre plus de 1.03 entre 9 et 13 cm de pénétration dans l'acier, soit une surestimation de 3%.

Nous avons tracé les spectres de flux neutroniques sur les Figure VIII-11, Figure VIII-12 et Figure VIII-13 à trois profondeurs de pénétration différentes sur l'axe central du réflecteur. Nous pouvons remarquer que la partie thermique du spectre disparaît au centre du réflecteur, loin du modérateur. La « décorrélation » entre les spectres calculés par APOLLO2 et TRIPOLI4 est principalement située aux énergies supérieures à 1 keV. On la remarque particulièrement sur la Figure VIII-12 à l'énergie des deux résonances de capture principales du  $^{56}\text{Fe}$  (1.15 keV et 23.5 keV) où le flux calculé par APOLLO2 est trop élevé. En entrée du réflecteur, au plus près de la zone fissile, les différences entre APOLLO2 et TRIPOLI4 dans certains groupes énergétiques donnés atteignent quelques pourcents tandis que dans les endroits les plus profonds, ces différences peuvent dépasser 20%. L'artefact visible autour de 0.4 eV est dû à la limite énergétique haute du traitement de l'up-scattering par TRIPOLI4 et contribue également à la « décorrélation des spectres ».

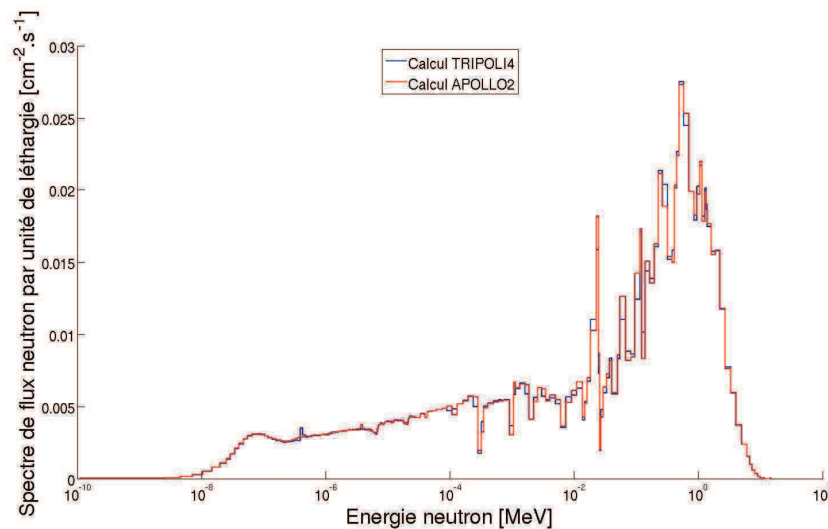


Figure VIII-11 Comparaison des spectres de flux neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 dans le réflecteur à une profondeur de 0.66 cm

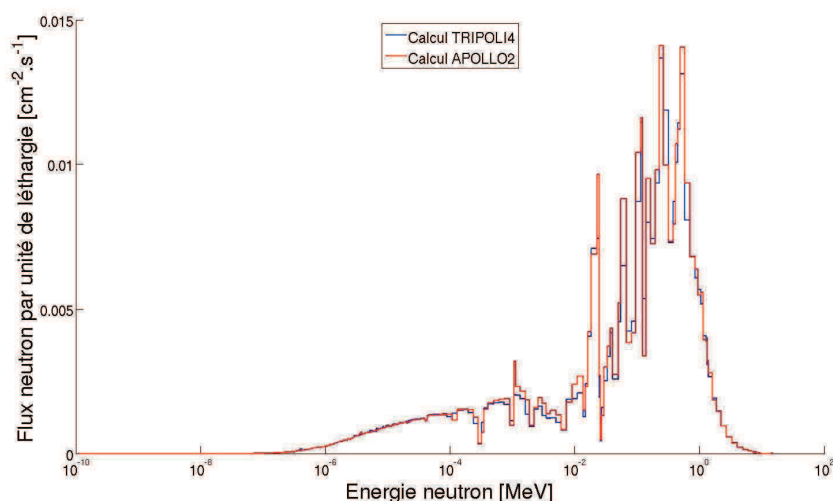
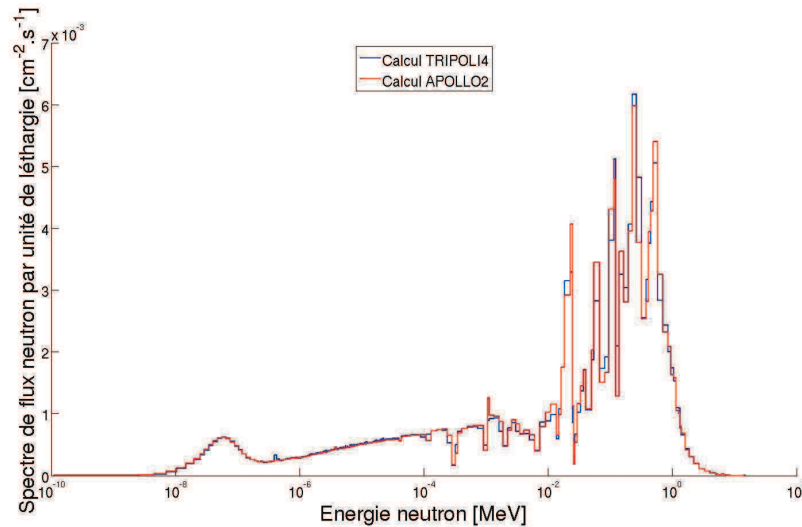
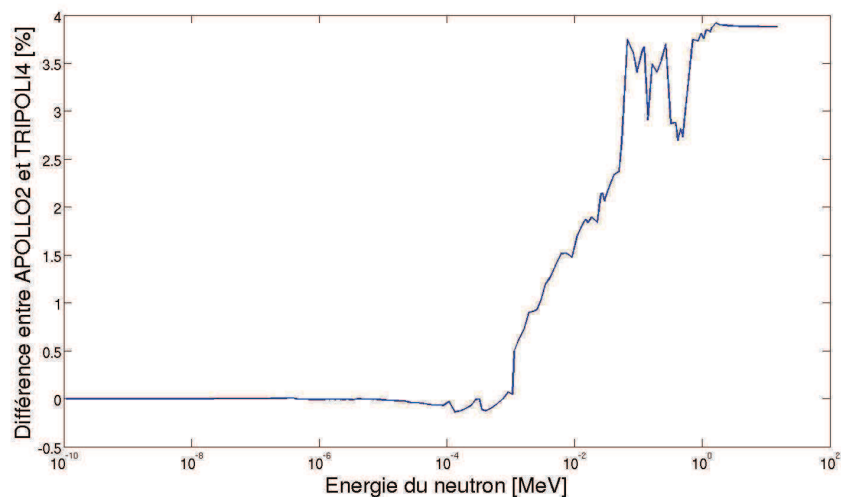


Figure VIII-12 Comparaison des spectres de flux neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 dans le réflecteur à une profondeur de 13.84 cm



**Figure VIII-13 Comparaison des spectres de flux neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 dans le réflecteur à une profondeur de 20.46cm**

Sur la Figure VIII-14, nous avons tracé la différence cumulée groupe à groupe entre le spectre de flux neutronique calculé avec APOLLO2 par rapport à TRIPOLI4 à une profondeur de 13.84 cm. Nous pouvons voir nettement que la surestimation du calcul APOLLO2 est entièrement due au flux d'énergie supérieure à 1 keV.

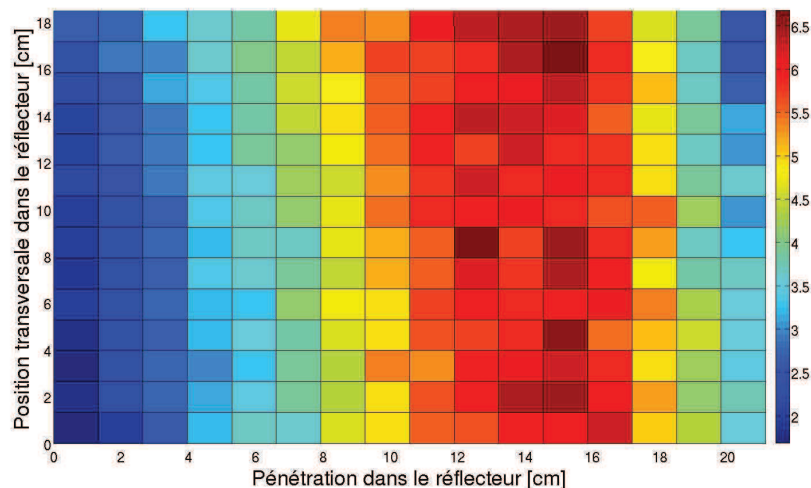


**Figure VIII-14 Différence cumulée entre les spectres neutroniques calculés avec APOLLO2 et**

**TRIPOLI4 à une profondeur de 13.84 cm ( $\sum_0^E (A2(E) - T4(E)) / \sum_0^{E_{\max}} T4(E) [\%]$ )**

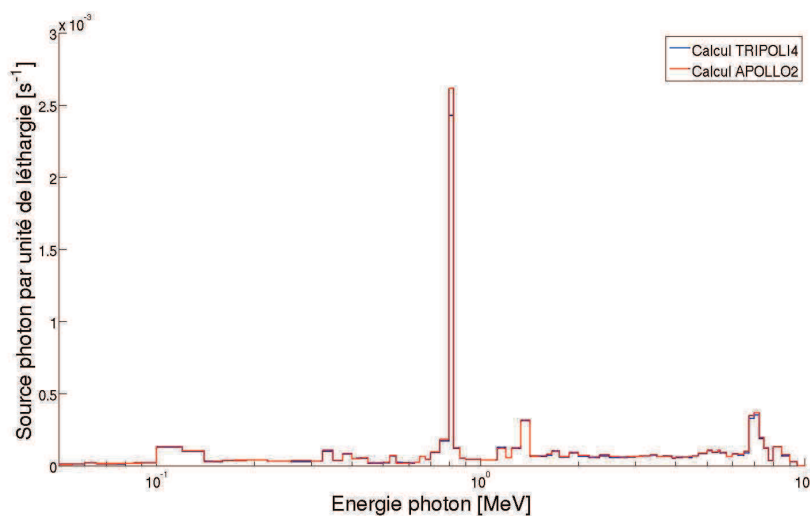
### **Validation des sources photoniques dans le réflecteur en acier**

La comparaison entre les multiplicités des sources gamma calculées avec APOLLO2 et TRIPOLI4 est représentée sur la Figure VIII-15. La multiplicité calculée par APOLLO2 surestime celle calculée par TRIPOLI4 de 2% en entrée du réflecteur et jusqu'à 6.5% autour de 14 cm de pénétration.



**Figure VIII-15 Différence sur la multiplicité des sources gamma calculées avec APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]**

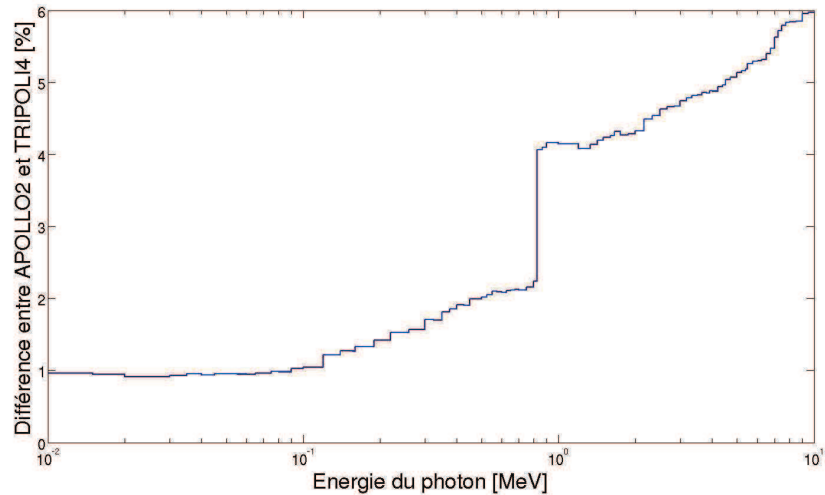
La surestimation de la source photon est en partie due aux photons créés lors de la diffusion inélastique des neutrons. La surestimation du flux neutronique dans les groupes correspondant aux résonances de capture du  $^{56}\text{Fe}$  contribue également à surestimer les sources photoniques de capture radiative du neutron. Sur la Figure VIII-16, nous avons tracé le spectre de production photonique à une profondeur de pénétration de 13.86 cm dans le réflecteur. Nous pouvons nettement distinguer le pic situé à 847 keV émis suite à la diffusion inélastique d'un neutron sur le 1<sup>er</sup> niveau excité du  $^{56}\text{Fe}$ . La différence sur sa hauteur entre APOLLO2 et TRIPOLI4 est d'environ 8% (surestimation par APOLLO2).



**Figure VIII-16 Spectre de production photonique à une profondeur de pénétration de 13.84 cm sur l'axe central du réflecteur**

Nous avons tracé sur la Figure VIII-17, la différence cumulée entre APOLLO2 et TRIPOLI4 sur le spectre de production photonique dans l'acier à une profondeur de 13.84 cm. Sur les 6 % de différence totale, 1% est dû aux photons émis par le premier niveau excité du  $^{57}\text{Fe}$  (14 keV) et 2% au premier niveau du  $^{56}\text{Fe}$  (847 keV). Le reste est dû à d'autres réactions inélastiques et à la capture résonante du  $^{56}\text{Fe}$ .





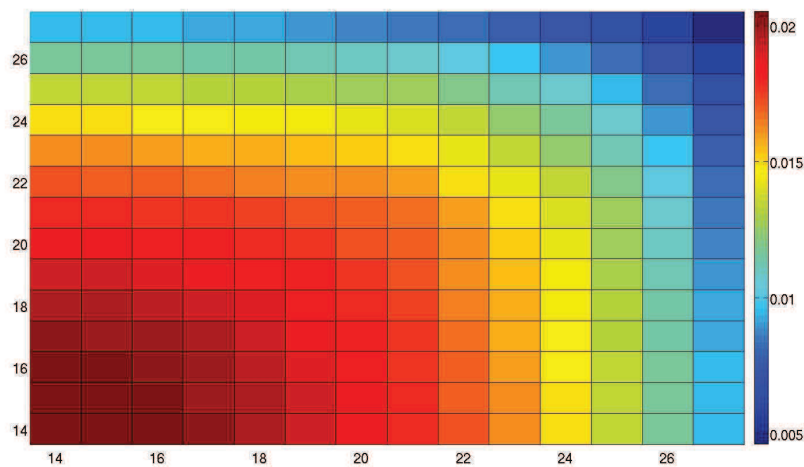
**Figure VIII-17 Différence cumulée entre les spectres de production photonique calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 à une profondeur de 13.84 cm ( $\sum_0^E (A2(E) - T4(E)) / \sum_0^{E_{\max}} T4(E)$  [%])**

#### VIII.2.iii.b Validation du transport $\gamma$

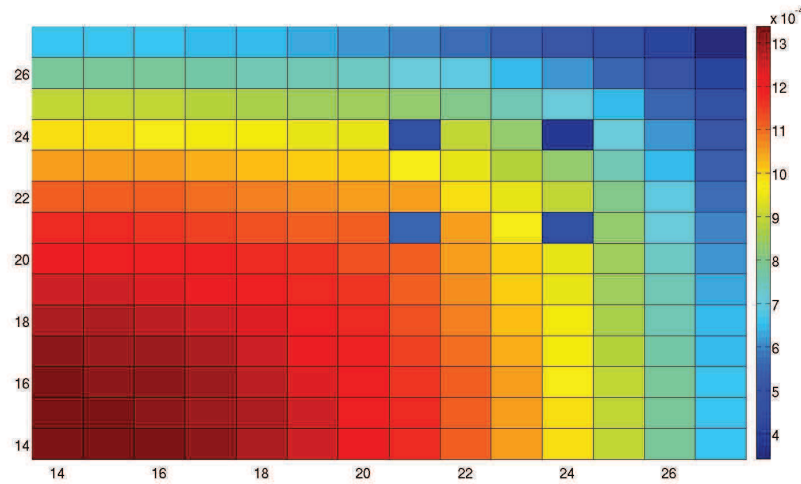
L'équation de transport des photons gamma a été résolue avec la méthode des caractéristiques MOC. Les sections de diffusion sont développées à l'ordre P5. La convergence numérique du calcul P5 par rapport aux autres ordres est disponible dans l'annexe B.

#### **Validation du calcul du KERMA $\gamma$ dans le combustible**

Le flux et le KERMA  $\gamma$  total dans le combustible calculés avec TRIPOLI4 sont représentés sur les Figure VIII-18 et Figure VIII-19 pour un quart de cœur. Comme pour le flux neutronique, les abscisses et ordonnées correspondent aux positions des crayons dans le réseau. La position 14-14 est centrale et la position 27-27 est un coin.



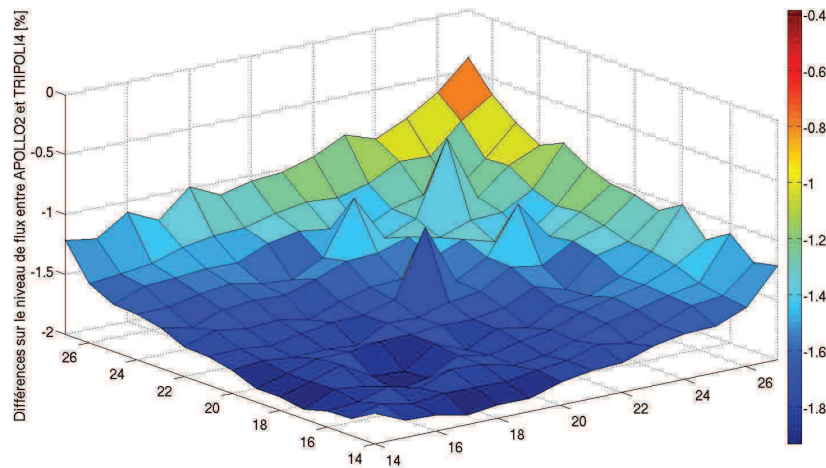
**Figure VIII-18 Niveau de flux photonique dans chaque crayon calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ]**



**Figure VIII-19 KERMA photon total dans chaque crayon calculé avec TRIPOLI4 [MeV.g<sup>-1</sup>.s<sup>-1</sup>]**

Les facteurs de forme du flux et du KERMA photon sont respectivement de 1.544 et de 1.537. Les points les plus chauds se situent bien évidemment au centre de la zone fissile. Dans les trous d'eau<sup>44</sup>, le KERMA est beaucoup plus faible que dans le combustible. L'eau est non seulement environ dix fois moins dense que le combustible mais elle possède également 10 fois moins d'électrons par molécule. Ses sections efficaces microscopiques comme macroscopiques sont donc très faibles en comparaison de celles du combustible.

La comparaison entre le KERMA calculé par APOLLO2 et celui calculé par TRIPOLI4 est représentée sur la Figure VIII-20. On constate des résultats similaires à ceux observés lors du calcul « cellule ». C'est-à-dire qu'au centre du cœur, où les crayons sont dans un milieu quasi-infini, le KERMA photon est sous-estimé par APOLLO2 d'environ 2%. Au plus près du réflecteur, cette sous-estimation diminue et n'atteint plus que 0.4% dans le meilleur des cas.



**Figure VIII-20 Différences des KERMA  $\gamma$  totaux dans le combustible entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]**

Les coefficients de corrélations entre les spectres de KERMA calculés par APOLLO2 et TRIPOLI4 sont tous supérieurs à 0.9996. Cependant, le coefficient directeur de la droite de régression linéaire oscille entre 0.98 au centre du cœur à 0.99 au plus près du réflecteur.

<sup>44</sup> Positions 21-21, 21-24, 24-21, 24-24

Cela confirme la sous-estimation observée sur le KERMA total entre le calcul APOLLO2 et le calcul TRIPOLI4 qui est de l'ordre de 2%.

### Validation du KERMA $\gamma$ dans le réflecteur

Le flux et le KERMA  $\gamma$  total dans le réflecteur calculé avec TRIPOLI4 sont représentés sur les Figure VIII-21 et Figure VIII-22. L'abscisse et l'ordonnée correspondent aux profondeurs de pénétration radiale et transversale dans le réflecteur.

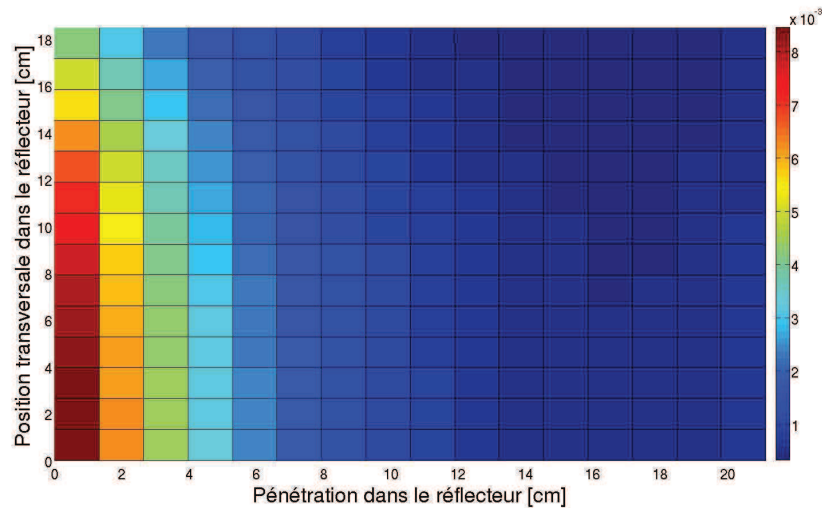


Figure VIII-21 Niveau de flux photonique dans le réflecteur calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ]

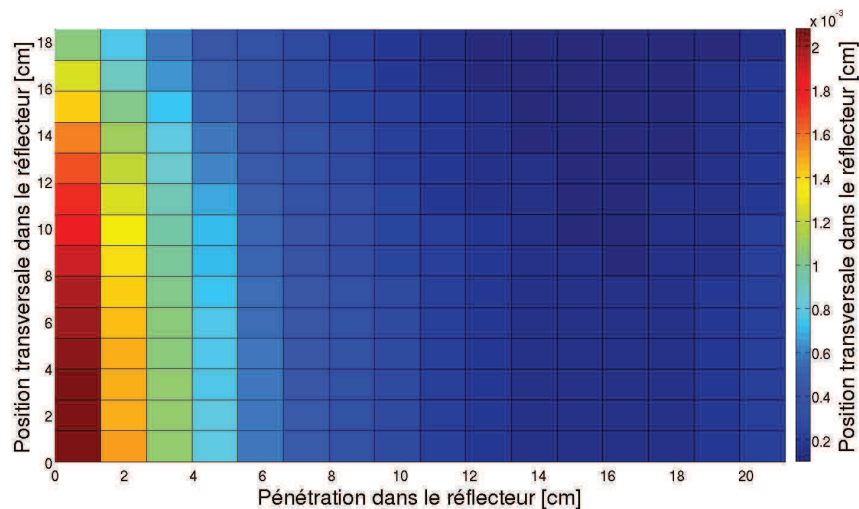
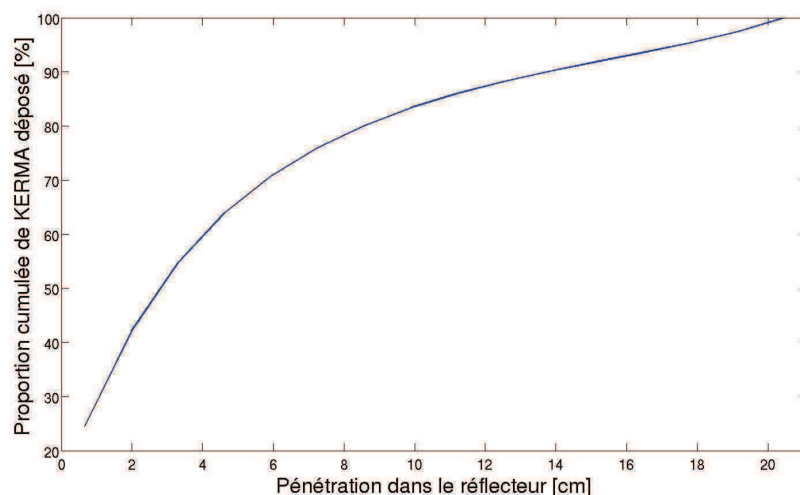


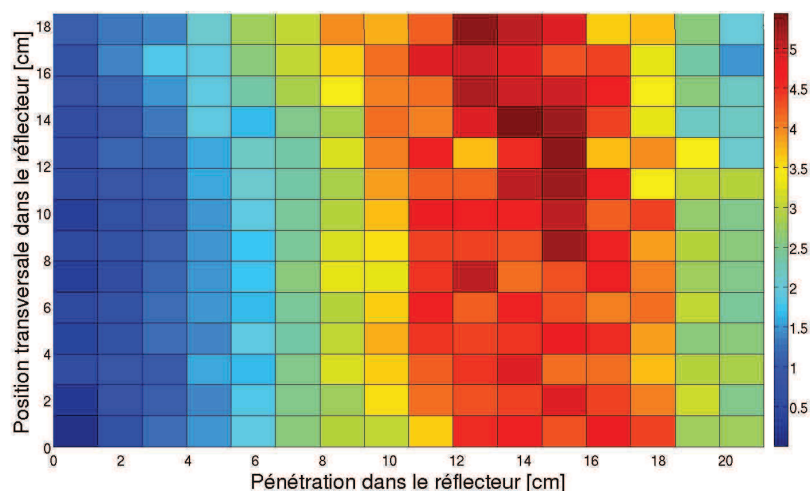
Figure VIII-22 KERMA photon total dans le réflecteur calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{MeV}.\text{g}^{-1}.\text{s}^{-1}$ ]

Nous pouvons constater que la majorité du KERMA est déposée dans les premiers centimètres de pénétration dans le réflecteur. Nous avons tracé sur la Figure VIII-23 la proportion cumulée de KERMA déposé sur la traverse centrale du réflecteur. Nous pouvons voir que plus de 50% du KERMA est déposé dans les 3 premiers centimètres du réflecteur. Cette valeur atteint 75% au bout de 7 cm.



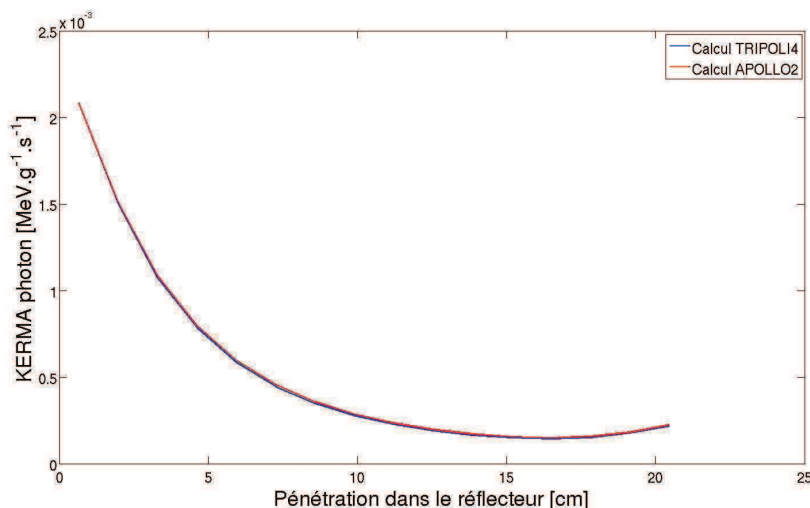
**Figure VIII-23 Proportion cumulée de KERMA déposé sur la traverse centrale du réflecteur**

Sur la Figure VIII-24, nous avons tracé la différence sur le KERMA total calculé par APOLLO2 et par TRIPOLI4 dans le réflecteur. A l'entrée du réflecteur, au niveau du point chaud, les deux codes sont en accord avec une différence inférieure à 1%. En s'éloignant de l'entrée du réflecteur, le KERMA calculé par APOLLO2 surestime le calcul de TRIPOLI4 jusqu'à atteindre une différence de près de 5.5% à une profondeur de 16 cm. Cependant, à cette profondeur, le KERMA total est très faible par rapport à celui déposé en entrée du réflecteur.



**Figure VIII-24 Différences des KERMA  $\gamma$  totaux dans le combustible entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]**

Nous avons tracé sur la Figure VIII-25 le KERMA  $\gamma$  total calculé par TRIPOLI4 et APOLLO2 sur la traverse centrale du réflecteur. Nous pouvons voir que le biais de 5% d'APOLLO2 sur le KERMA autour d'une profondeur de 16 cm est en réalité très faible en absolu.



**Figure VIII-25 KERMA  $\gamma$  total sur la traverse centrale du réflecteur**

Les coefficients de corrélation entre les spectres calculés par APOLLO2 et TRIPOLI4 sont presque tous supérieurs à 0.999. Les différences maximales pour un groupe énergétique particulier entre APOLLO2 et TRIPOLI4 peuvent atteindre 10%.

#### VIII.2.iii.c Conclusion intermédiaire

Nous avons effectué une validation systématique des flux neutroniques, sources photoniques, flux photoniques et KERMA photoniques dans la partie fissile et la partie réflecteur du cœur PERLE.

Dans la partie fissile, nous avons observé un très bon accord entre APOLLO2 et TRIPOLI4 sur les flux neutroniques. Les niveaux de flux étaient quasiment similaires à 0.4% près. Les formes des spectres étaient également très proches entre les deux calculs avec des coefficients de corrélation presque partout de l'ordre de 0.9999. Le flux et le KERMA  $\gamma$  quant à eux sont sous-estimés d'environ 2% au centre de la zone fissile comme nous l'avions déjà observé dans la géométrie cellule infinie.

Dans la partie réflecteur, les spectres de flux neutroniques sont bien décrits (au biais lié à l'up-scattering près) jusqu'à une énergie de 1 keV. Au-delà, ils tendent à être surestimés notamment dans les deux groupes contenant les deux premières résonances de capture du  $^{56}\text{Fe}$ . Le niveau de flux total a tendance à être surestimé à mesure que l'on pénètre profondément dans le réflecteur. Cette surestimation passe ainsi d'environ 0% à 4%.

La surestimation du flux neutronique joue beaucoup sur la production des sources photonique. Ainsi, la multiplicité  $\gamma$  est systématiquement surestimée de 2 à 6% dans tout le réflecteur. Cette surestimation provient en grande partie des sources de diffusions inélastiques du  $^{56}\text{Fe}$  et du  $^{57}\text{Fe}$ , et des sources de capture radiative du  $^{56}\text{Fe}$ .

Tous ces biais se répercutent sur le calcul du flux et du KERMA photonique. Ainsi, le KERMA total est bien évalué avec APOLLO2 à l'entrée du réflecteur (<0.5% de différence avec TRIPOLI4) puis tend à être surestimé jusqu'à 5.5% en pénétrant dans le réflecteur.

De manière générale, la qualité des résultats obtenus avec APOLLO2 se dégrade en pénétrant dans le réflecteur. Cependant, comme les niveaux de flux et de KERMA diminuent très rapidement en s'éloignant de la zone fissile, en absolu, ces biais sont presque négligeables par rapport au KERMA total déposé dans le réflecteur.

### VIII.2.iv Validation du calcul de la composante $\gamma$ retardée

Les mesures dans l'expérience PERLE ont été effectuées sur une courte durée (10 minutes). Les émissions retardées n'ont pas le temps de s'équilibrer. Dans le code APOLLO2, le spectre retardé simulé est censé être représentatif d'un spectre à l'équilibre. Nous ne pouvons donc pas utiliser APOLLO2 pour interpréter PERLE. La comparaison du niveau de KERMA dans le cœur calculé avec APOLLO2 et TRIPOLI4 en incluant la composante retardée est représentée sur la Figure VIII-26 APOLLO2 surestime le KERMA déposé de plus de 20%.

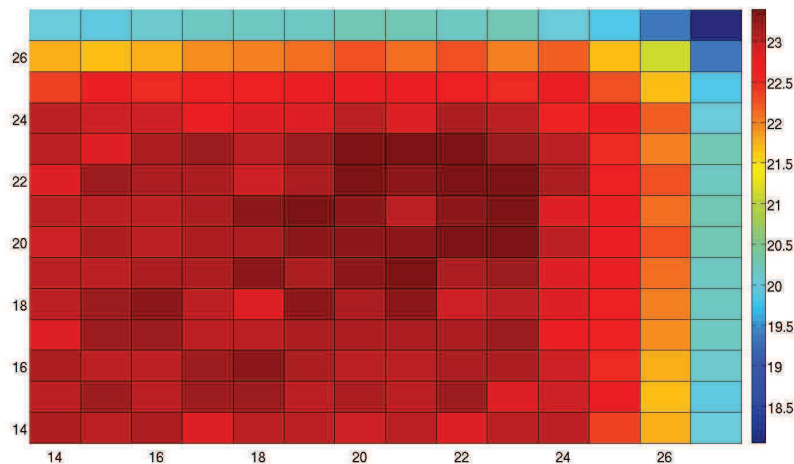


Figure VIII-26 Différences des KERMA  $\gamma$  totaux avec la composante retardée dans le combustible entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]

## VIII.3 QUALIFICATION D'APOLLO2.8-3 : INTERPRETATION DE PERLE

Dans la partie précédente, nous avons apporté des éléments de validation du calcul du KERMA photonique avec APOLLO2 par comparaison avec le code TRIPOLI4. Dans cette partie, nous qualifions le code APOLLO2 en comparant les KERMA calculés avec les résultats des mesures effectuées lors de l'expérience PERLE. APOLLO2 est un code de transport de particules neutres en 2D ne prenant pas en compte certains phénomènes physiques. Il est donc nécessaire d'appliquer des coefficients de corrections aux mesures afin de les rendre interprétables.

### VIII.3.i Rappel des corrections de cavité et de passage dose → KERMA des TLD

APOLLO2, comme la plupart des codes de transport déterministe, ne permet pas simuler le transport des électrons. Par conséquent, APOLLO2 ne peut calculer que le KERMA  $\gamma$  déposé dans les matériaux et non pas la dose. Il n'est donc pas possible de calculer avec APOLLO2 la dose déposée dans les piluliers car celle-ci dépend du transport des électrons. Cependant, grâce aux coefficients de cavité, il est possible de ramener la dose déposée dans les TLD au KERMA déposé dans le matériau environnant, c'est-à-dire une grandeur calculable par APOLLO2.

Ainsi, l'expression du KERMA déposé dans le matériau environnant en fonction des mesures des TLD peut s'écrire :

$$KERMA_{n-p}^{\gamma, \text{matériau}} = D_{n-p-e^{\pm}}^{TLD} \times [C_{\text{cavité}}] = D_{n-p-e^{\pm}}^{\text{Totale, TLD}} \times [C_{\text{dose neutron}} \times C_{\text{cavité}}]$$

Nous donnons dans le Tableau VIII-11 les coefficients de correction de la dose neutronique et les coefficients de cavité pour les TLD de types CaF2 fins et épais. Ces coefficients ont été obtenus avec une composante  $\gamma$  retardés caractéristique de l'irradiation de 10 minutes de l'expérience PERLE. Dans la zone fissile, les coefficients de correction de cavité ont été calculés pour un environnement acier et un environnement combustible UO<sub>2</sub>. Les calculs APOLLO2 effectués ne simulent pas l'acier entourant les TLD dans le cœur à cause de la difficulté de la mise en place du calcul (problème d'autoprotection, dissymétrie de la géométrie, ...). Par conséquent, lors de la qualification, nous prendrons en compte les coefficients de corrections dans le combustible.

**Tableau VIII-11 Benchmarking de l'expérience PERLE**

<b>TLD CaF2 Fin</b>	<b><math>C_{dose\ neutron}</math></b>	<b><math>C_{cav}</math></b>	<b><math>KERMA\gamma(np) / DOSE\ TOT</math></b>	<b><math>KERMA\gamma(np)</math> "Expérimental" [mGy]</b>
<b>Centre cœur (combustible)</b>	0.941 ± 0.034	2.047 ± 0.029	1.926 ± 0.075	<b>1812.6 ± 70.6</b>
<b>Coté cœur (combustible)</b>	0.941 ± 0.037	2.194 ± 0.043	2.065 ± 0.091	<b>1059.3 ± 46.7</b>
<b>Centre cœur (acier)</b>	0.941 ± 0.034	1.090 ± 0.020	1.026 ± 0.042	<b>965.6 ± 39.5</b>
<b>Coté cœur (acier)</b>	0.941 ± 0.037	1.004 ± 0.024	0.945 ± 0.043	<b>484.8 ± 22.1</b>
<b>R2</b>	0.940 ± 0.029	1.040 ± 0.007	0.978 ± 0.031	<b>163.2 ± 5.2</b>
<b>R4</b>	0.928 ± 0.035	1.018 ± 0.009	0.945 ± 0.037	<b>78.1 ± 3.1</b>
<b>R6</b>	0.923 ± 0.037	1.028 ± 0.010	0.949 ± 0.039	<b>46.2 ± 1.9</b>
<b>R8</b>	0.921 ± 0.038	1.042 ± 0.009	0.960 ± 0.045	<b>29.0 ± 1.4</b>
<b>R10</b>	0.912 ± 0.043	1.017 ± 0.014	0.928 ± 0.046	<b>20.1 ± 1.0</b>
<b>R12</b>	0.923 ± 0.037	1.053 ± 0.010	0.972 ± 0.040	<b>17.4 ± 0.7</b>
<b>R14</b>	0.948 ± 0.027	1.037 ± 0.009	0.983 ± 0.029	<b>18.7 ± 0.6</b>

<b>TLD CaF2 Epais</b>	<b><math>C_{dose\ neutron}</math></b>	<b><math>C_{cav}</math></b>	<b><math>KERMA\gamma(np) / DOSE\ TOT</math></b>	<b><math>KERMA\gamma(np)</math> "Expérimental" [mGy]</b>
<b>Centre cœur (combustible)</b>	0.950 ± 0.028	2.0534 ± 0.039	1.950 ± 0.068	<b>1708.4 ± 59.6</b>
<b>Coté cœur (combustible)</b>	0.948 ± 0.032	2.0849 ± 0.050	1.976 ± 0.082	<b>915.5 ± 38.0</b>
<b>Centre cœur (acier)</b>	0.950 ± 0.028	1.086 ± 0.015	1.031 ± 0.034	<b>903.6 ± 29.8</b>
<b>Coté cœur (acier)</b>	0.948 ± 0.032	1.056 ± 0.020	1.001 ± 0.039	<b>463.7 ± 18.1</b>
<b>R2</b>	0.951 ± 0.024	1.060 ± 0.006	1.001 ± 0.026	<b>149.0 ± 3.9</b>
<b>R4</b>	0.941 ± 0.029	1.044 ± 0.006	0.982 ± 0.031	<b>75.9 ± 2.4</b>
<b>R6</b>	0.937 ± 0.031	1.060 ± 0.008	0.993 ± 0.034	<b>46.1 ± 1.6</b>
<b>R8</b>	0.934 ± 0.033	1.043 ± 0.010	0.974 ± 0.036	<b>27.1 ± 1.0</b>
<b>R10</b>	0.926 ± 0.035	1.042 ± 0.009	0.965 ± 0.037	<b>19.4 ± 0.7</b>



<b>R12</b>	0.928 ± 0.034	1.048 ± 0.009	0.973 ± 0.037	<b>15.9 ± 0.6</b>
<b>R14</b>	0.954 ± 0.023	1.068 ± 0.009	1.019 ± 0.026	<b>17.0 ± 0.4</b>

Le détail du calcul des coefficients de cavité et du facteur de correction de la dose neutronique est expliqué dans le chapitre précédent. Ces deux coefficients sont indépendants. Par conséquent, l'incertitude sur le produit des deux s'exprime ainsi :

$$\delta(C_{cav} \cdot C_{neutron}) = \sqrt{(C_{cav} \delta C_{neutron})^2 + (C_{neutron} \delta C_{cav})^2}$$

Les valeurs en absolu du KERMA dans ce tableau sont donc données à titre d'ordre de grandeur et les incertitudes ne prennent pas en compte les incertitudes expérimentales. La qualification d'APOLLO2 sera faite par rapport aux doses relatives au centre cœur comme lors de la qualification de TRIPOLI4.

Les KERMA moyens sont consignés dans le Tableau VIII-12.

**Tableau VIII-12 KERMA- $\gamma$  (transport np) « expérimentaux » PERLE en 3D**

$\gamma$ -prompts et retardés	KERMA $\gamma$ (np) "Exp." [mGy]
<b>Centre cœur (combustible)</b>	<b>1760.5 ± 65.1</b>
<b>Côté cœur (Combustible)</b>	<b>987.4 ± 42.4</b>
<b>Centre cœur (acier)</b>	<b>934.6 ± 34.7</b>
<b>Côté cœur (acier)</b>	<b>474.3 ± 20.1</b>
<b>R2</b>	<b>156.1 ± 4.6</b>
<b>R4</b>	<b>77.0 ± 2.8</b>
<b>R6</b>	<b>46.2 ± 1.8</b>
<b>R8</b>	<b>28.1 ± 1.2</b>
<b>R10</b>	<b>19.8 ± 0.9</b>
<b>R12</b>	<b>16.7 ± 0.7</b>
<b>R14</b>	<b>17.9 ± 0.5</b>

Les TLD CaF2 fins et épais sont situés juste à côté les uns des autres et ont été simulés durant le même calcul TRIPOLI4. Par conséquent, les facteurs correctifs qui leurs sont attribués sont nécessairement corrélés. Afin d'envelopper l'incertitude sur les KERMA moyens nous avons considéré que la corrélation était totale. Par conséquent, l'incertitude s'écrit :

$$\delta \bar{K} = \frac{1}{2} (\delta K_{CaF2\text{ fin}} + \delta K_{CaF2\text{ épais}})$$

### VIII.3.ii Estimation de la correction des effets 3D par TRIPOLI4.8

APOLLO2 effectue des calculs en deux dimensions. L'étape suivante de la benchmarkisation de l'expérience PERLE consiste donc à ramener les KERMA « expérimentaux » de trois à deux dimensions. Une seconde solution consisterait à effectuer un pseudo calcul 3D avec APOLLO2 en utilisant les sections de fuites dans un modèle B1-

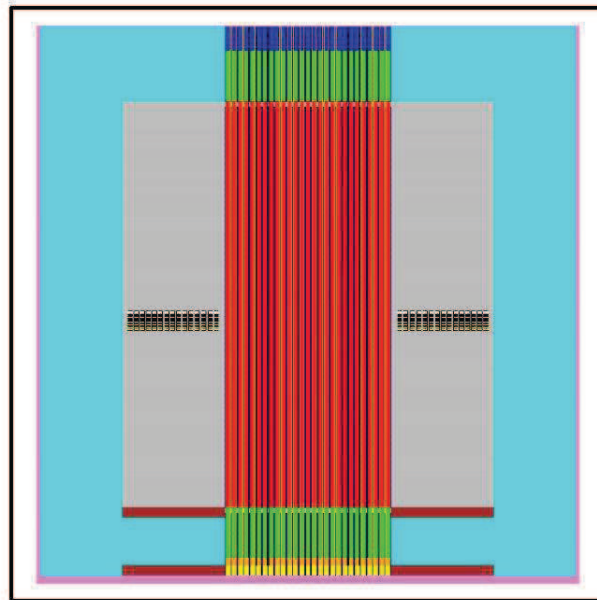
homogène. Cependant, cette méthode nécessite une bonne connaissance du  $B_z^2$ . Celui-ci n'a pas été mesuré pour les photons et sa valeur varie dans le réflecteur.

Les KERMA « expérimentaux » précédents doivent donc encore être multipliés par un nouveau facteur de passage de la 3D à la 2D :

$$F_{3D \rightarrow 2D} = \frac{KERMA_{n-p,2D}^{\gamma,ACIER}}{KERMA_{n-p,3D}^{\gamma,ACIER}}$$

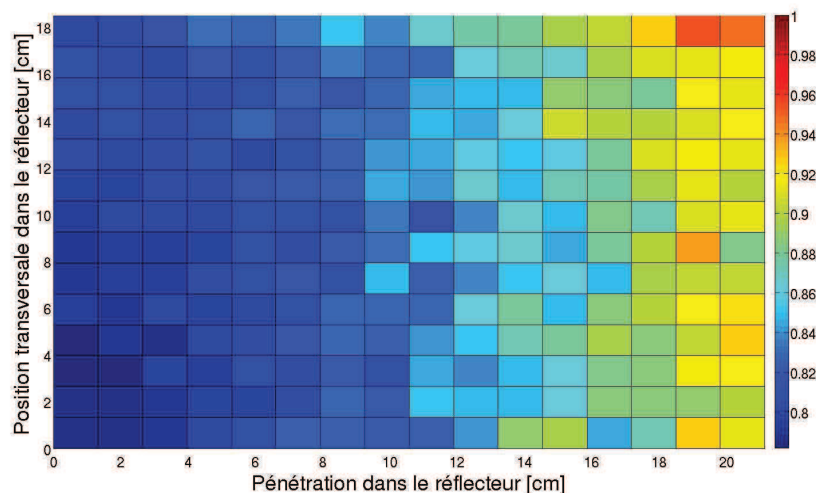
Le numérateur correspond au KERMA calculé dans une géométrie PERLE en deux dimensions (aucune fuite de particule le long de l'axe z en imposant des conditions de réflexion). Le dénominateur correspond au KERMA calculé dans la géométrie PERLE réelle en trois dimensions. Ces deux quantités sont estimées à travers deux calculs TRIPOLI4 indépendants. L'expression de l'incertitude sur ce rapport est donc similaire à celle du coefficient de cavité.

La géométrie réelle du cœur PERLE est représentée sur la Figure VIII-27. Nous pouvons voir en gris le réflecteur, en rouge le combustible et au centre du réflecteur les piluliers contenant les TLD. Nous pouvons noter que les piluliers ne sont pas parfaitement centrés dans le réflecteur. Ils sont légèrement décalés vers le bas.



**Figure VIII-27 Coupe axiale du cœur PERLE**

Les coefficients de passage 3D/2D prompts (sans prendre en compte la composante retardée dans le rapport des KERMA) dans tout le réflecteur en acier ont été représentés sur la Figure VIII-28. Les KERMA calculés dans la géométrie 3D ont été renormalisés à la hauteur fissile réelle du cœur PERLE qui est de 80 cm. Dans la géométrie 3D, les volumes dans lesquels le KERMA a été calculé sont ceux utilisés lors de la validation d'APOLLO2 à la différence qu'ils ne mesurent plus que 2 cm de hauteur et sont situés axialement au centre du réflecteur. Les coefficients de passage 3D/2D sont beaucoup plus importants en entrée du réflecteur. Près de la zone fissile, le niveau de flux neutronique axial a une forme sinusoïdale très proche de celle observée dans les crayons combustibles. En s'éloignant de la zone fissile, le flux neutronique et par conséquent les sources  $\gamma$  « s'aplatissent » au centre par diffusion. C'est pourquoi les coefficients de passage 3D/2D y sont moins importants.



**Figure VIII-28 Coefficients de passage 3D/2D sur les KERMA  $\gamma$  prompts calculés avec TRIPOLI4 (T4\_2D/T4\_3D)**

Ces coefficients de passage 3D/2D basés sur des calculs ne prenant en compte que les photons prompts ne sont pas suffisants pour qualifier APOLLO2 vis-à-vis de l'expérience PERLE. En effet, les TLD intègrent aussi bien la dose prompte que retardée. Il faut donc calculer dans les deux géométries 2D et 3D, le KERMA total. De plus, il faut également prendre en compte le léger décalage des points de mesure et par conséquent ne pas centrer les volumes de calcul dans la géométrie 3D. Les nouveaux coefficients de passage 3D/2D prenant en compte tous ces effets sont donnés dans le

Tableau VIII-13 pour les 9 points de mesures. Comme nous l'avons dit précédemment, la valeur absolue de la puissance du cœur PERLE est mal connue. La qualification du code APOLLO2 se fera donc avec les valeurs des KERMA relatifs au centre cœur.

**Tableau VIII-13 Facteur de passage 3D avec photon retardé  $\rightarrow$  2D avec photon retardé**

$\gamma$ -prompts et retardés	$F_{3D \rightarrow 2D}$	KERMA $\gamma(np)$ "Exp." [mGy]	KERMA $\gamma(np)$ "Exp." [relatif]
Centre cœur (combustible)	0.7735 $\pm$ 0.0018	1361.7 $\pm$ 50.5	1.0000 $\pm$ 0.0000
Côté cœur (combustible)	0.7870 $\pm$ 0.0020	777.1 $\pm$ 33.4	0.5707 $\pm$ 0.0323
R2	0.7442 $\pm$ 0.0019	116.2 $\pm$ 3.4	0.0853 $\pm$ 0.0040
R4	0.7943 $\pm$ 0.0029	61.2 $\pm$ 2.2	0.0449 $\pm$ 0.0023
R6	0.8079 $\pm$ 0.0034	37.3 $\pm$ 1.4	0.0274 $\pm$ 0.0015
R8	0.8185 $\pm$ 0.0044	23.0 $\pm$ 1.0	0.0169 $\pm$ 0.0010
R10	0.8402 $\pm$ 0.0056	16.6 $\pm$ 0.7	0.0122 $\pm$ 0.0007
R12	0.8504 $\pm$ 0.0063	14.2 $\pm$ 0.6	0.0104 $\pm$ 0.0006
R14	0.9160 $\pm$ 0.0061	16.4 $\pm$ 0.5	0.0120 $\pm$ 0.0006

Les incertitudes sur les KERMA calculés à l'emplacement des différentes mesures sont très certainement corrélées. Cependant, afin de majorer l'incertitude sur le KERMA

relatif, nous avons considéré qu'elles étaient décorrélées. Par conséquent, l'incertitude sur le KERMA relatif s'écrit :

$$\delta K_{\text{relatif}} = K_{\text{relatif}} \sqrt{\left( \frac{\delta K_{TLD \text{ centre coeur}}}{K_{TLD \text{ centre coeur}}} \right)^2 + \left( \frac{\delta K_{TLD}}{K_{TLD}} \right)^2}$$

### VIII.3.iii Qualification APOLLO2.8 des KERMA-photon dans le cas d'une faible irradiation (PERLE)

#### VIII.3.iii.a Qualification du KERMA total (prompt + retardé)

Bien qu'à l'heure actuelle, APOLLO2 ne puisse pas simuler de manière performante le transport des photons retardés, nous avons tout de même souhaité estimer le biais sur le KERMA par rapport aux mesures. Les résultats sont disponibles dans le Tableau VIII-14 sous forme d'écarts calcul-expérience. L'incertitude est donnée à  $1\sigma$  et prend cette fois-ci en compte aussi bien les incertitudes sur les coefficients de correction que les incertitudes relatives expérimentales. Ainsi, son expression s'écrit:

$$\delta_{C/E} = \frac{C}{E} \sqrt{\left( \frac{\delta_{\text{fin}} + \delta_{\text{epais}}}{2} \right)^2 + \delta_{\text{calc}}^2}$$

$\delta_{\text{fin}}$  et  $\delta_{\text{epais}}$  sont les incertitudes relatives sur les mesures par TLD de type CaF2 fins et épais. En l'absence de données, nous avons considéré que les deux mesures étaient totalement corrélées car elles étaient effectuées en même temps.  $\delta_{\text{calc}}$  est l'incertitude relative du calcul qui est liée à la convergence de TRIPOLI4 et au biais sur l'estimation de la composante neutron. La mesure et le calcul sont indépendants.

**Tableau VIII-14 Qualification des sources et du transport photonique d'APOLLO2**

$\gamma$ -prompts et retardés	(C/E-1)± $\delta$ E/E [%]
<b>Centre cœur</b>	+0.0 ± 0
<b>Côté cœur</b>	+0.5 ± 6.8
<b>R2</b>	-8.0 ± 6.5
<b>R4</b>	-9.0 ± 6.6
<b>R6</b>	-14.0 ± 6.3
<b>R8</b>	-11.3 ± 6.8
<b>R10</b>	-12.5 ± 6.8
<b>R12</b>	-11.8 ± 6.6
<b>R14</b>	-9.3 ± 6.3
<b>Moyenne Comb.</b>	+0.5 ± 6.8
<b>Moyenne Refl.</b>	-9.7 ± 6.5

Nous constatons que le KERMA relatif déposé dans le réflecteur est sous-estimé d'environ 11% en moyenne. Ce résultat est bien sûr dû à la surestimation par APOLLO2 de la source de gamma retardés. La fraction du KERMA correspondant aux photons retardés est plus importante dans la zone fissile que dans le réflecteur.

## VIII.3.iii.b Qualification des KERMA ne prenant en compte que la dose prompte

Nous nous sommes affranchis de la composante retardée du KERMA photon. Pour cela, nous avons du calculé un nouveau facteur correctif permettant de passer du KERMA photon total vers le KERMA photon uniquement dû à la composante prompte. Les résultats sont donnés dans le Tableau VIII-15. L'incertitude sur les facteurs de correction est calculée de manière identique à celle des autres facteurs. On constate que cette correction est très importante dans la zone fissile (~20%) et s'estompe jusqu'à devenir négligeable en pénétrant dans le réflecteur. Cela est bien évidemment dû à la localisation des sources de photons retardées qui sont situées dans le combustible.

Tableau VIII-15 Facteur de passage prompt+retardé→prompt

	$F_{\text{prompt+retardé} \rightarrow \text{prompt}}$	$KERMA_{\gamma(np)}$ "Exp." [mGy]	$KERMA_{\gamma(np)}$ "Exp." [relatif]
<b>Centre cœur (combustible)</b>	0.7933 ± 0.0010	1080.3 ± 40.0	<b>1.0000 ± 0.0000</b>
<b>Côté cœur (combustible)</b>	0.8056 ± 0.0007	626.0 ± 26.9	<b>0.5795 ± 0.0329</b>
<b>R2</b>	0.9167 ± 0.0016	106.5 ± 3.1	<b>0.0986 ± 0.0047</b>
<b>R4</b>	0.9407 ± 0.0021	57.5 ± 2.1	<b>0.0533 ± 0.0028</b>
<b>R6</b>	0.9583 ± 0.0028	35.8 ± 1.4	<b>0.0331 ± 0.0018</b>
<b>R8</b>	0.9734 ± 0.0036	22.4 ± 1.0	<b>0.0207 ± 0.0012</b>
<b>R10</b>	0.9837 ± 0.0043	16.4 ± 0.7	<b>0.0151 ± 0.0009</b>
<b>R12</b>	0.9914 ± 0.0047	14.1 ± 0.6	<b>0.0130 ± 0.0007</b>
<b>R14</b>	0.9970 ± 0.0044	16.3 ± 0.5	<b>0.0151 ± 0.0007</b>

A partir de ces résultats, nous avons pu qualifier le calcul du KERMA  $\gamma$  prompt d'APOLLO2. Les résultats sont donnés dans le Tableau VIII-16.

Tableau VIII-16 Qualification du KERMA prompt d'APOLLO2

$\gamma$ -prompts	$(C/E-1) \pm \delta E/E$ [%]
<b>Centre cœur</b>	0 ± 0
<b>Côté cœur</b>	+2.0 ± 7.0
<b>R2</b>	+1.9 ± 7.2
<b>R4</b>	+3.5 ± 7.5
<b>R6</b>	-0.0 ± 7.4
<b>R8</b>	+4.8 ± 8.0
<b>R10</b>	+4.6 ± 8.1
<b>R12</b>	+6.5 ± 8.0
<b>R14</b>	+10.2 ± 7.7
<b>Moyenne Comb.</b>	+3.0 ± 7.0
<b>Moyenne Refl.</b>	+3.0 ± 7.5

A l'exception des deux points de mesure situés le plus profondément dans le réflecteur, APOLLO2 a permis de reproduire les mesures de KERMA dans l'expérience PERLE à environ 4% près avec une incertitude de l'ordre de 8% ( $1\sigma$ ).

## VIII.4 CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS

Nous avons effectué une validation du code APOLLO2 pour le calcul de KERMA photon par rapport à TRIPOLI4 dans deux géométries : un crayon de type UOx en milieu infini et la géométrie critique du programme expérimental PERLE en 2D (avec un  $B_z^2$  nul). Pour cela, nous avons proposé une méthode systématique comparant les spectres de flux neutronique ainsi que de source, de flux et de KERMA photonique calculés par les deux codes dans différents milieux. A chaque fois, le coefficient de corrélation linéaire ainsi que les coefficients de la droite de régression linéaire entre les spectres APOLLO2 et TRIPOLI4 ont été calculés afin de quantifier leurs biais.

Dans le cas cellule, le calcul APOLLO2 sous-estime d'environ 2% la multiplicité totale des sources  $\gamma$  promptes dans le combustible. Cette sous-estimation est répartie sur l'ensemble du spectre de production gamma et non pas uniquement sur un groupe d'énergie. Elle se répercute sur le calcul du flux et du KERMA  $\gamma$  qui tous deux sous-estiment également les résultats du calcul TRIPOLI4.

Dans le cas PERLE, nous avons validé le code APOLLO2 dans le combustible de la zone fissile ainsi que dans le réflecteur en acier :

- Dans la zone fissile, la forme et le niveau du flux neutronique d'APOLLO2 est quasiment identique à celui de TRIPOLI4. Les crayons situés au centre, qui se trouvent dans un environnement équivalent à un milieu infini, observent les mêmes écarts sur les sources  $\gamma$  promptes entre APOLLO2 et TRIPOLI4 que dans le cas cellule. C'est-à-dire une sous-estimation d'environ 2% de la multiplicité  $\gamma$  totale.
- Dans le réflecteur lourd en acier, aux basses énergies (inférieures à quelques keV), le flux neutronique d'APOLLO2 est très proche de celui de TRIPOLI4 (aux biais dus au traitement de l'up-scattering près). Aux énergies supérieures à quelques keV, les deux spectres neutroniques sont beaucoup moins bien corrélés avec des différences groupe par groupe pouvant aller jusqu'à 20%<sup>45</sup>. Cette décorrélation augmente (le coefficient de corrélation diminue) en s'éloignant de la zone fissile. On constate notamment une surestimation du flux neutronique par APOLLO2 dans les 2 groupes contenant les résonances de capture du  $^{56}\text{Fe}$ . Les calculs des sources promptes, du flux et du KERMA  $\gamma$  sont impactés par la déviation du flux neutronique. Ainsi, à l'interface avec la zone fissile, le KERMA  $\gamma$  total d'APOLLO2 est identique à celui de TRIPOLI4. A mesure que l'on pénètre plus profondément dans le réflecteur cette différence augmente jusqu'à atteindre environ 5%.

Nous avons ensuite qualifié le code APOLLO2 par rapport aux mesures par détecteurs thermo-luminescents effectuées dans le cœur critique du programme PERLE. Pour cela, une première étape a consisté à ramener les mesures des TLD à un KERMA photon dans les matériaux sur une géométrie 2D afin de les rendre interprétables par APOLLO2. Trois facteurs correctifs ont ainsi été calculés avec TRIPOLI4:

- Le facteur de correction de la dose neutron qui supprime de la réponse des TLD la composante due aux neutrons,

---

<sup>45</sup> Pour des groupes significatifs d'un point de vue statistique

- Le facteur de cavité qui permet de passer de la dose déposée dans les TLD au KERMA déposé dans le matériau environnant,
- Le facteur de passage 3D/2D qui permet de ramener le problème réel à un problème en 2 dimensions modélisable par APOLLO2.

Une fois ces trois facteurs calculés, nous avons pu obtenir des comparaisons calcul-expérience. Nous avons ainsi observé une nette sous-estimation d'environ  $(-11 \pm 6.6)\%$  ( $1\sigma$ ) de la dose relative calculée par APOLLO2 par rapport à la dose relative mesurée corrigée. Ce problème est dû à l'incapacité actuelle pour APOLLO2 de simuler correctement un spectre retardé qui n'est pas à l'équilibre.

Pour poursuivre la qualification d'APOLLO2, nous avons dû utiliser un dernier coefficient de correction correspondant au passage du KERMA total à un KERMA ne prenant en compte que la composante  $\gamma$  prompt. Les nouveaux résultats obtenus sont cette fois-ci bien meilleurs. Pour les 6 premiers TLD du réflecteur, la différence entre calcul et mesure est toujours inférieure à  $(7 \pm 8)\%$  ( $1\sigma$ ). Pour le dernier TLD, on observe une surestimation d'environ  $(10 \pm 8)\%$ . Cette surestimation avait déjà été observée lors de la qualification du code TRIPOLI4.

Afin d'améliorer la qualification d'APOLLO2, il conviendrait de simuler de l'acier à l'emplacement des mesures dans le cœur PERLE et non pas du combustible tel que cela a été fait dans cette étude. Cependant, cela nécessite de produire une nouvelle géométrie non symétrisée tout en vérifiant qu'il n'y a pas de problème d'autoprotection du fer.

Il serait également intéressant de valider le calcul du KERMA avec APOLLO2 par la méthode des ordonnées discrètes Sn.





## Conclusions et perspectives

Le but de cette thèse était de qualifier les outils nécessaires au calcul des échauffements photonique dans les réacteurs nucléaires. Nous nous sommes focalisés sur trois outils : les données de production photonique dans JEFF-3.1.1, le code de transport déterministe APOLLO2 et le code de transport Monte Carlo TRIPOLI4.

### Analyse critique de JEFF-3.1.1 et production de nouvelles évaluations

L'analyse critique des données contenues dans la bibliothèque JEFF-3.1.1 a montré que celle-ci contenait des erreurs et des omissions. Nous avons par exemple constaté que certains noyaux possédaient des spectres de productions photoniques qui ne respectaient pas les valeurs des chaleurs de réaction. Nous avons donc proposé et mis en application une méthodologie permettant de produire de nouvelles évaluations contenant de nouveaux spectres de production  $\gamma$  de capture radiative du neutron. En effet, cette interaction neutron-matière est, avec la fission, la principale contributrice à l'échauffement  $\gamma$ . Ces nouvelles évaluations prennent en compte les mesures contenues dans la base de données EGAF ainsi que des calculs théoriques effectués à l'aide du code de modélisation des réactions nucléaires TALYS. Elles ont été proposées et acceptées pour la prochaine bibliothèque JEFF-3.2.

### Qualification du code TRIPOLI4 en interprétant l'expérience PERLE

La qualification du code Monte Carlo a été effectuée en interprétant les mesures d'échauffements  $\gamma$  par TLD dans le cœur PERLE. Pour cela, nous avons dû effectuer trois calculs séparés afin d'estimer les 3 composantes photons prompt et retardé, et neutronique intégrées par les TLD. Pour calculer la composante  $\gamma$  prompte, nous avons proposé 3 méthodologies de calcul afin d'améliorer la convergence.

Dans le cas de l'interprétation « PERLE homogène », en moyenne, les écarts calcul-expérience sur les mesures effectuées dans le réflecteur en acier sont inférieurs à  $(+1 \pm 6\%)$  ( $1\sigma$ ). Les méthodes d'amélioration de la convergence ont permis de réduire l'incertitude au niveau de l'incertitude expérimentale. Dans le cas de l'interprétation « PERLE trou d'eau », ces méthodes n'étaient pas applicables. Par conséquent, les écarts calcul-expérience ont des incertitudes associées beaucoup plus importantes. Ainsi, ces mêmes écarts sont de l'ordre de  $(-2 \pm 12\%)$  ( $1\sigma$ ). Ces écarts sont résumés dans le tableau suivant.

PERLE Homogène		
	CaF2 épais	CaF2 fin
Zone fissile	$0.4 \pm 4.2$	$2.5 \pm 5.5$
Réflecteur	$0.0 \pm 5.0$	$0.4 \pm 6.1$

Perle Trou d'eau		
	CaF2 épais	CaF2 fin
Zone fissile	$-2.4 \pm 5.1$	$-0.4 \pm 6.5$
Réflecteur	$-1.9 \pm 8.9$	$-0.9 \pm 11.6$

Ainsi, le code de calcul TRIPOLI4 permet de calculer correctement les échauffements photoniques mesurés par les TLD dans l'acier relativement à la dose mesurée au centre du cœur.

La comparaison des calculs d'échauffement photonique dans les deux configurations « PERLE homogène » et « PERLE trou d'eau » dans les matériaux entourant les TLD a montré que l'ajout de canaux d'eau dans le réflecteur induisait une augmentation de la dose déposée de près de 15% dans le réflecteur. Les trous d'eau induisent donc une augmentation de la chaleur produite dans le réflecteur. Ce comportement semble paradoxal puisque leur but principal est justement d'évacuer la chaleur du réflecteur.

### **Validation et qualification du code APOLLO2**

La qualification du code APOLLO2 a commencé par une phase de validation qui comprenait des comparaisons calcul-calcul avec TRIPOLI4. Nous avons pour cela utilisé deux géométries :

- Un crayon combustible REP en milieu infini,
- La géométrie de l'expérience PERLE en 2 dimensions.

Nous avons ainsi montré que la source de photon dans le combustible est sous-estimée par APOLLO2. Cela induit une sous-estimation d'un peu moins de 2% de la dose déposée dans les différents éléments constituant les réseaux de crayons combustibles. Le flux neutronique épithermique et rapide est surévalué dans le réflecteur en acier. Il est notamment surévalué dans les 2 groupes contenant les deux résonances de capture du  $^{56}\text{Fe}$ . Par conséquent, les sources de  $\gamma$  de capture radiative et de diffusion inélastique sont surestimées. Cette surestimation est d'autant plus importante que la profondeur de pénétration dans le réflecteur est élevée. Ainsi, les comparaisons calcul-calcul entre APOLLO2 et TRIPOLI4 du KERMA photon montrent un biais d'environ +5% pour une profondeur de pénétration d'environ 14 cm et un biais presque nul à l'interface avec la zone fissile. 50% de la dose étant déposée dans les trois premiers centimètres de pénétration, les biais à 14 cm n'ont presque pas d'incidence sur la dose totale déposée dans le réflecteur.

Les mesures d'échauffement photonique dans PERLE ont dû être corrigées afin de les rendre interprétables par APOLLO2. Nous avons ainsi calculé plusieurs facteurs de passage :

- Le facteur de dose neutron afin de s'affranchir de la réponse neutronique mesurée par le TLD,
- Les coefficients de cavité afin de s'affranchir de la simulation des TLD,
- Le facteur de passage 3D/2D afin de ramener le problème à une mesure en deux dimensions.

Après application de ces facteurs aux mesures PERLE, la qualification d'APOLLO2 a montré une sous-estimation d'environ -10% de la dose déposée dans le réflecteur par rapport à la dose déposée dans le cœur. Celle-ci est causée par la mauvaise prise en compte des sources retardées par APOLLO2. En effet, le spectre de photons  $\gamma$  retardés dans APOLLO2 n'est pas modulable et est caractéristique d'un réacteur dans lequel les produits de fission sont à l'équilibre. Nous avons donc calculé un dernier facteur de passage afin de nous affranchir de la composante retardée de la dose photonique. Les nouveaux écarts calcul-expérience moyens obtenus pour les TLD situés dans le réflecteur sont de l'ordre de  $(+3\pm 7\%)$  ( $1\sigma$ ).

Ainsi, le code APOLLO2 permet de bien reproduire la dose déposée par les photons prompts durant l'expérience PERLE. Dans le cas des réacteurs nucléaires, la partie retardée peut être prise en compte.

### **Perspectives**

En 2012, un nouveau programme expérimental nommé AMON[96] qui à l'heure actuelle est toujours en cours a débuté dans le réacteur EOLE. Des mesures d'échauffements photoniques ont été effectuées par l'intermédiaire de TLD et d'OSLD (un détecteur semblable au TLD mais dont l'interrogation est effectuée par stimulation laser). La méthode d'interprétation avec TRIPOLI4 et peut-être APOLLO2 est celle qui a été utilisée dans le cadre de l'interprétation des mesures PERLE. Grace au travail effectué par Hicham Ahmarrak durant sa thèse[97], les incertitudes expérimentales ont pu être réduites à environ 3% à  $1\sigma$  permettant ainsi une meilleure précision sur les écarts calcul-expérience et par conséquent une meilleure qualification des codes de calculs. De plus, contrairement à PERLE, l'interprétation des mesures peut être effectuée en absolu car la masse effective de la chambre à fission est connue.

Nous avons vu lors de l'analyse critique des données contenues dans la bibliothèque JEFF-3.1.1 que les données de désintégrations radioactives étaient incomplètes. Il existe de nombreuses bibliothèques de données nucléaires en libre accès contenant les données manquantes. C'est notamment le cas de la bibliothèque appelée Nudat. Un travail a été débuté durant cette thèse afin de développer un traducteur permettant de mettre au format ENDF les informations contenues dans cette bibliothèque afin de proposer de nouvelles évaluations pour la prochaine version de la bibliothèque JEFF. Ce travail sera transmis et peut être poursuivi par le doctorant en charge de l'interprétation des mesures dans AMON.

Le dernier axe d'amélioration consiste à transposer les résultats obtenus aux réacteurs de génération III. D'après la théorie de la représentativité, Il est possible de transposer les biais de calcul par rapport à une expérience E (et son incertitude expérimentale) pour une application A. Ce travail peut être très complexe car les échauffements  $\gamma$  sont sensibles à de nombreux paramètres dont les sections efficaces neutroniques et les spectres de production photonique. Les sensibilités ne peuvent être calculées que par la théorie généralisée des perturbations[98].



## **Annexe A Etat des lieux des sources photoniques contenues dans JEFF-3.1**

Dans cette annexe, nous listons les données de sources photoniques contenues dans la bibliothèque JEFF-3.1.1 en précisant l'emplacement dans le formalisme ENDF (MF et MT).

Dans le Tableau A-1, nous listons les données associées aux diffusions inélastiques discrète et continue. Nous précisons également le nombre total de niveau discret pris en compte.

Dans le Tableau A-2, nous listons les données associées à la capture radiative du neutron. Nous précisons dans la dernière colonne si les spectres contenus dans JEFF-3.1.1 sont cohérents d'un point de vue énergétique vis-à-vis de la chaleur de réaction. Si la case associée est cochée, cela signifie que cette cohérence est vérifiée.

Dans le Tableau A-3, nous comparons les chaleurs de réactions annoncées dans JEFF-3.1.1 à celles calculées à partir des masses contenues dans la bibliothèque AME03 pour la capture radiative neutronique des principaux produits de fission responsables de l'antiréactivité.

**Tableau A-1 Etat des lieux des sources de  $\gamma$  de diffusion inélastique du neutron dans la bibliothèque JEFF-3.1.1**

Noyau	Nombre de niveaux inélastiques	MF6 MT50+i	MF6 MT91	MF12/MF14 MT50+i	MF12/14/15 MT91	MF13/14/15 MT3	MF13/14/15 MT4
<sup>11</sup> B	10		X				
<sup>16</sup> O	7		X				X
<sup>22</sup> Na	11						
<sup>23</sup> Na	27			X			
<sup>24</sup> Mg	11			X	X		
<sup>25</sup> Mg	17			X	X		
<sup>26</sup> Mg	13			X	X		
<sup>27</sup> Al	39	X	X				
<sup>28</sup> Si	17	X			X		
<sup>29</sup> Si	29	X			X		
<sup>30</sup> Si	14	X			X		
<sup>31</sup> P	6						X
<sup>32</sup> S	6			X	X		
<sup>33</sup> S	7			X	X		
<sup>34</sup> S	5			X	X		
<sup>36</sup> S	5			X	X		
<sup>46</sup> Ti	20	X	X				
<sup>47</sup> Ti	20	X	X				
<sup>48</sup> Ti	20	X	X				

<sup>49</sup> Ti	20	X	X				
<sup>50</sup> Ti	20	X	X				
<sup>50</sup> Cr	6		X	X			
<sup>52</sup> Cr	10		X	X			
<sup>53</sup> Cr	13		X	X			
<sup>54</sup> Cr	4		X	X			
<sup>55</sup> Mn	16						X
<sup>54</sup> Fe	20	X	X				
<sup>56</sup> Fe	32		X	X			
<sup>57</sup> Fe	20	X	X				
<sup>58</sup> Fe	20	X	X				
<sup>59</sup> Co	19						
<sup>58</sup> Ni	8		X	X			
<sup>60</sup> Ni	11		X	X			
<sup>61</sup> Ni	8		X	X			
<sup>62</sup> Ni	4		X	X			
<sup>64</sup> Ni	2		X	X			
<sup>63</sup> Cu	22	X	X				
<sup>65</sup> Cu	13	X	X				
<sup>90</sup> Zr	7			X	X		
<sup>91</sup> Zr	14			X	X		
<sup>92</sup> Zr	17			X	X		
<sup>94</sup> Zr	14			X	X		
<sup>96</sup> Zr	7			X	X		
<sup>92</sup> Mo	16					X	
<sup>94</sup> Mo	19					X	
<sup>95</sup> Mo	4		X	X			
<sup>96</sup> Mo	17					X	
<sup>97</sup> Mo	13					X	
<sup>98</sup> Mo	14					X	
<sup>100</sup> Mo	4					X	
<sup>107</sup> Ag	6						
<sup>109</sup> Ag	14						
<sup>111</sup> Ag	10						



<sup>106</sup> Cd	5						
<sup>108</sup> Cd	10						
<sup>110</sup> Cd	14						
<sup>111</sup> Cd	11						
<sup>112</sup> Cd	8						
<sup>113</sup> Cd	12						
<sup>114</sup> Cd	10						
<sup>116</sup> Cd	6						
<sup>113</sup> In	24						
<sup>115</sup> In	13						
<sup>112</sup> Sn	23						
<sup>114</sup> Sn	26						
<sup>115</sup> Sn	16						
<sup>116</sup> Sn	18						
<sup>117</sup> Sn	12						
<sup>118</sup> Sn	7						
<sup>119</sup> Sn	20						
<sup>120</sup> Sn	16						
<sup>122</sup> Sn	9						
<sup>124</sup> Sn	20						
<sup>152</sup> Gd	29						
<sup>154</sup> Gd	15						
<sup>155</sup> Gd	29						
<sup>156</sup> Gd	14						
<sup>157</sup> Gd	28						
<sup>158</sup> Gd	11						
<sup>160</sup> Gd	6						
<sup>174</sup> Hf	18			X	X		
<sup>176</sup> Hf	23			X	X		
<sup>177</sup> Hf	16			X	X		
<sup>178</sup> Hf	21			X	X		
<sup>179</sup> Hf	12			X	X		
<sup>180</sup> Hf	11			X	X		
<sup>234</sup> U	36						

<sup>235</sup> U	34						X
<sup>236</sup> U	31					X	
<sup>238</sup> U	40					X	

Tableau A-2 des lieux des sources de  $\gamma$  de capture du neutron dans la bibliothèque JEFF-3.1.1

Noyau	MF6 MT102	MF12/14/15 MT102	Cohérence
<sup>1</sup> H		X	X
<sup>10</sup> B		X	
<sup>11</sup> B		X	X
<sup>16</sup> O		X	
<sup>22</sup> Na			
<sup>23</sup> Na		X	X
<sup>24</sup> Mg		X	X
<sup>25</sup> Mg		X	X
<sup>26</sup> Mg		X	X
<sup>27</sup> Al		X	
<sup>28</sup> Si		X	X
<sup>29</sup> Si		X	X
<sup>30</sup> Si		X	X
<sup>31</sup> P		X	X
<sup>32</sup> S		X	X
<sup>33</sup> S		X	X
<sup>34</sup> S		X	X
<sup>36</sup> S		X	X
<sup>46</sup> Ti	X		
<sup>47</sup> Ti	X		
<sup>48</sup> Ti	X		
<sup>49</sup> Ti	X		
<sup>50</sup> Ti	X		
<sup>50</sup> Cr		X	X
<sup>52</sup> Cr		X	X
<sup>53</sup> Cr		X	X
<sup>54</sup> Cr		X	X

<sup>55</sup> Mn		X	X
<sup>54</sup> Fe	X		
<sup>56</sup> Fe		X	
<sup>57</sup> Fe	X		
<sup>58</sup> Fe	X		
<sup>59</sup> Co		X	X
<sup>58</sup> Ni		X	X
<sup>60</sup> Ni		X	
<sup>61</sup> Ni		X	X
<sup>62</sup> Ni		X	X
<sup>64</sup> Ni		X	X
<sup>63</sup> Cu		X	X
<sup>65</sup> Cu		X	X
<sup>90</sup> Zr		X	X
<sup>91</sup> Zr		X	X
<sup>92</sup> Zr		X	X
<sup>94</sup> Zr			
<sup>96</sup> Zr		X	X
<sup>92</sup> Mo			
<sup>94</sup> Mo	X		X
<sup>95</sup> Mo	X		X
<sup>96</sup> Mo		X	X
<sup>97</sup> Mo		X	X
<sup>98</sup> Mo		X	X
<sup>100</sup> Mo		X	X
<sup>107</sup> Ag			
<sup>109</sup> Ag			
<sup>111</sup> Ag			
<sup>106</sup> Cd			
<sup>108</sup> Cd			
<sup>110</sup> Cd			
<sup>111</sup> Cd			
<sup>112</sup> Cd			
<sup>113</sup> Cd			

<sup>114</sup> Cd			
<sup>116</sup> Cd			
<sup>113</sup> In			
<sup>115</sup> In			
<sup>112</sup> Sn			
<sup>114</sup> Sn			
<sup>115</sup> Sn			
<sup>116</sup> Sn			
<sup>117</sup> Sn			
<sup>118</sup> Sn			
<sup>119</sup> Sn			
<sup>120</sup> Sn			
<sup>122</sup> Sn			
<sup>124</sup> Sn			
<sup>152</sup> Gd			
<sup>154</sup> Gd			
<sup>155</sup> Gd			
<sup>156</sup> Gd			
<sup>157</sup> Gd			
<sup>158</sup> Gd			
<sup>160</sup> Gd			
<sup>174</sup> Hf		X	X
<sup>176</sup> Hf		X	X
<sup>177</sup> Hf		X	X
<sup>178</sup> Hf		X	X
<sup>179</sup> Hf		X	X
<sup>180</sup> Hf		X	X
<sup>234</sup> U			
<sup>235</sup> U		X	X
<sup>236</sup> U		X	X
<sup>238</sup> U		X	X

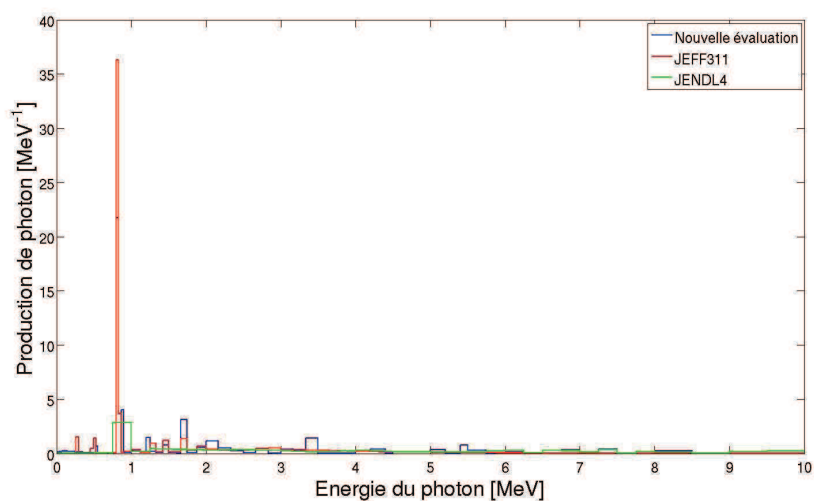
**Tableau A-3 Comparaison des chaleurs de capture radiative tabulées dans JEFF-3.1.1 et calculées à partir des masses tabulées dans AME03**

Noyau	chaleur de réaction [MeV]		JEFF-3.1.1/AME03	Incertitude AME03
	AME03	JEFF-3.1.1		
<sup>135</sup> Xe	8.07942 ± 0.00823	7.880	-2.468%	0.102%
<sup>103</sup> Rh	6.99896 ± 0.00008	6.999	0.001%	0.001%
<sup>143</sup> Nd	7.81703 ± 0.00005	7.829	0.157%	0.001%
<sup>133</sup> Cs	6.89164 ± 0.00001	6.704	-2.716%	0.000%
<sup>131</sup> Xe	8.93659 ± 0.00022	8.936	-0.003%	0.002%
<sup>149</sup> Sm	7.98673 ± 0.00038	7.982	-0.054%	0.005%
<sup>99</sup> Tc	6.76440 ± 0.00010	6.764	0.000%	0.001%
<sup>155</sup> Eu	6.33968 ± 0.00535	6.490	2.371%	0.084%
<sup>151</sup> Sm	8.25760 ± 0.00062	8.223	-0.417%	0.008%
<sup>153</sup> Eu	6.44223 ± 0.00024	6.441	-0.013%	0.004%
<sup>152</sup> Sm	5.86840 ± 0.00013	5.867	-0.024%	0.002%
<sup>154</sup> Eu	8.15140 ± 0.00040	8.167	0.191%	0.005%
<sup>145</sup> Nd	7.56523 ± 0.00009	7.564	-0.016%	0.001%
<sup>147</sup> Pm	5.89528 ± 0.00565	5.901	0.104%	0.096%
<sup>109</sup> Ag	6.80920 ± 0.00010	6.805	-0.062%	0.001%
<sup>101</sup> Ru	9.21964 ± 0.00005	9.220	-0.007%	0.001%
<sup>95</sup> Mo	9.15432 ± 0.00005	9.154	-0.003%	0.001%
<sup>150</sup> Sm	5.59646 ± 0.00011	5.596	-0.008%	0.002%
<sup>105</sup> Pd	9.56097 ± 0.00028	9.548	-0.138%	0.003%
<sup>148m</sup> Pm	7.27066 ± 0.00658	7.266	-0.064%	0.091%
<sup>134</sup> Cs	8.76199 ± 0.00100	8.800	0.434%	0.011%
<sup>108</sup> Pd	6.15360 ± 0.00015	6.154	0.007%	0.002%
<sup>147</sup> Sm	8.14141 ± 0.00028	8.141	-0.005%	0.003%
<sup>157</sup> Gd	7.93739 ± 0.00006	7.937	-0.005%	0.001%
<sup>107</sup> Pd	9.22803 ± 0.00522	9.223	-0.055%	0.057%
<sup>141</sup> Pr	5.84315 ± 0.00008	5.843	-0.003%	0.001%
<sup>93</sup> Zr	8.22111 ± 0.00195	8.219	-0.031%	0.024%
<sup>135</sup> Cs	6.82818 ± 0.00215	6.764	-0.934%	0.031%
<sup>103</sup> Ru	8.90141 ± 0.00283	8.904	0.028%	0.032%

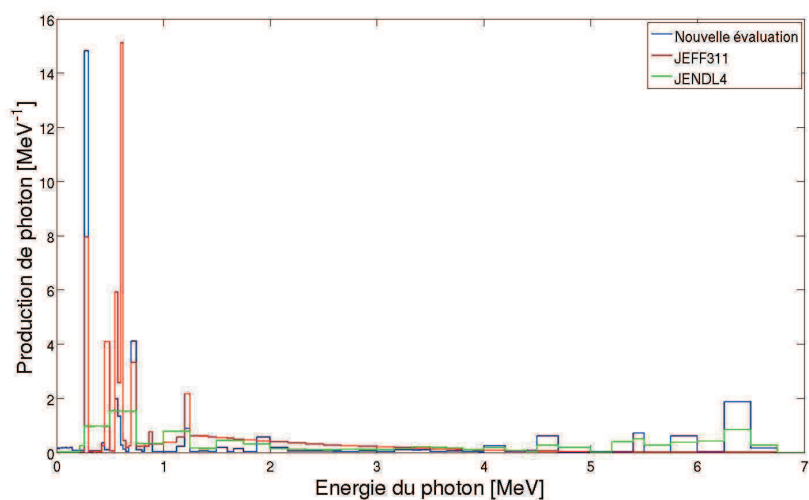


## **Annexe B Nouveaux spectres de capture radiative insérés dans les nouvelles évaluations**

Dans cette annexe, nous représentons les spectres insérés dans les nouvelles évaluations qui n'ont pas été représentés dans le chapitre 5.



**Figure B-1 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{57}\text{Fe}$  avec les autres évaluations**



**Figure B-2 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{58}\text{Fe}$  avec les autres évaluations**



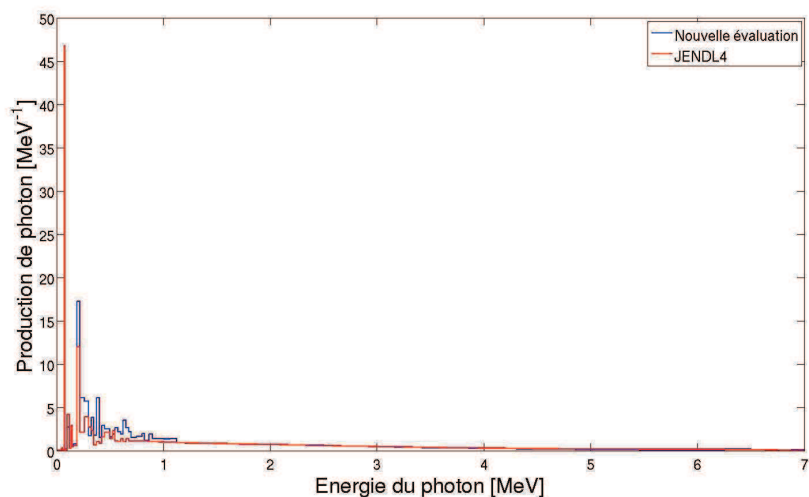


Figure B-3 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{107}\text{Ag}$  avec les autres évaluations

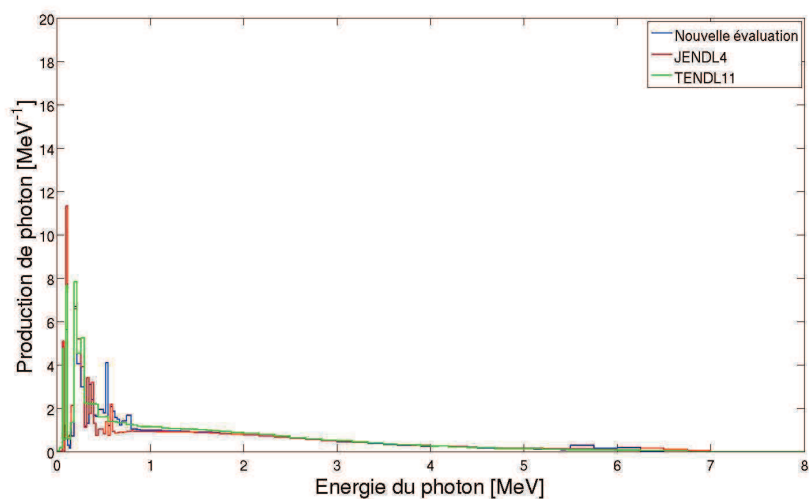


Figure B-4 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{109}\text{Ag}$  avec les autres évaluations

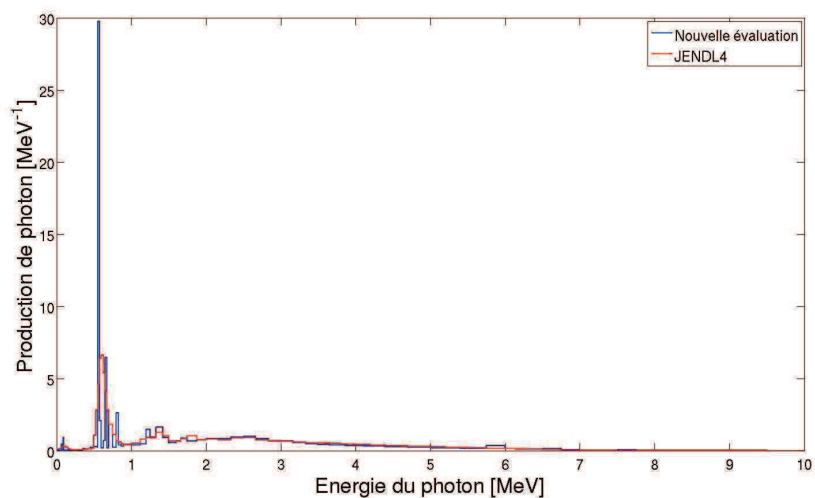


Figure B-5 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{113}\text{Cd}$  avec les autres évaluations

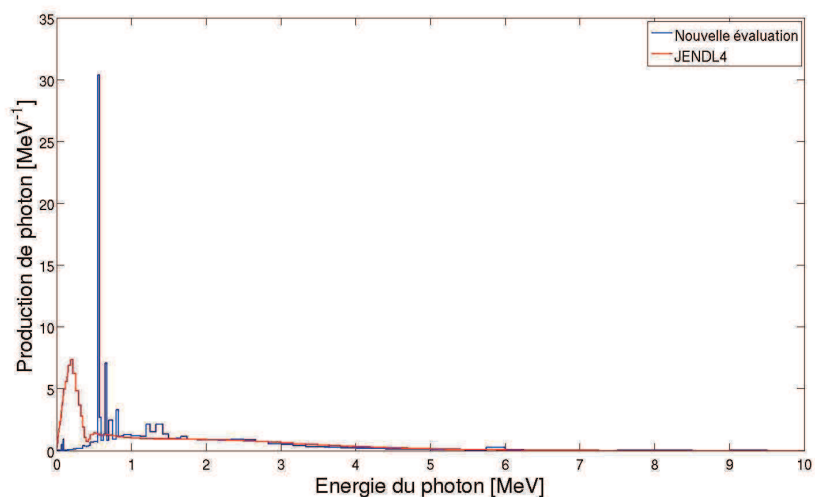


Figure B-6 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{113}\text{In}$  avec les autres évaluations

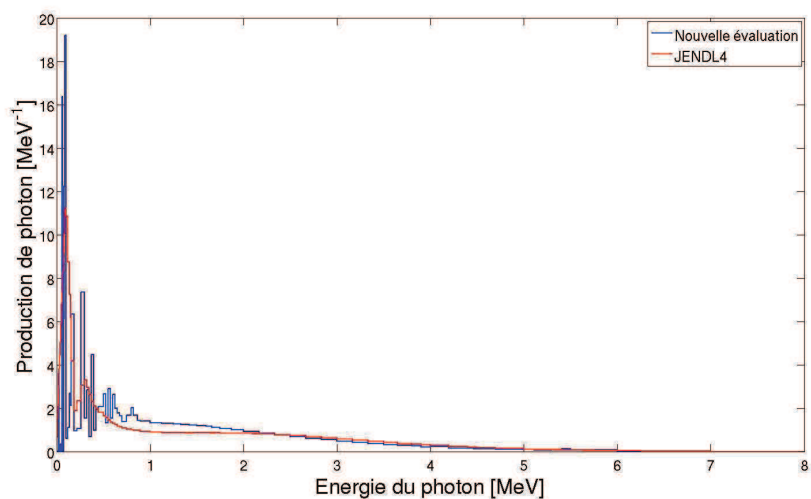


Figure B-7 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{115}\text{In}$  avec les autres évaluations

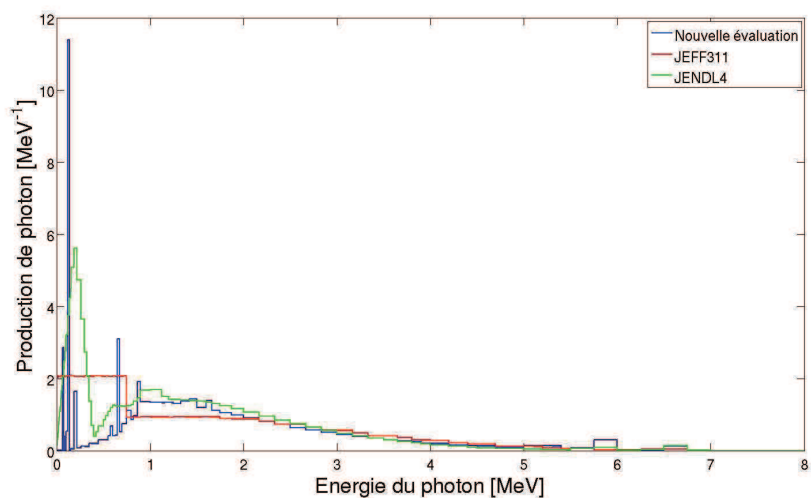


Figure B-8 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{174}\text{Hf}$  avec les autres évaluations

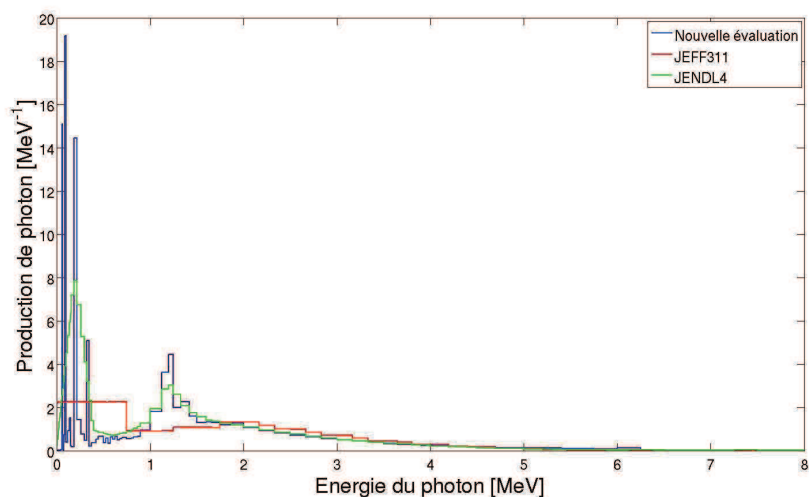


Figure B-9 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{177}\text{Hf}$  avec les autres évaluations

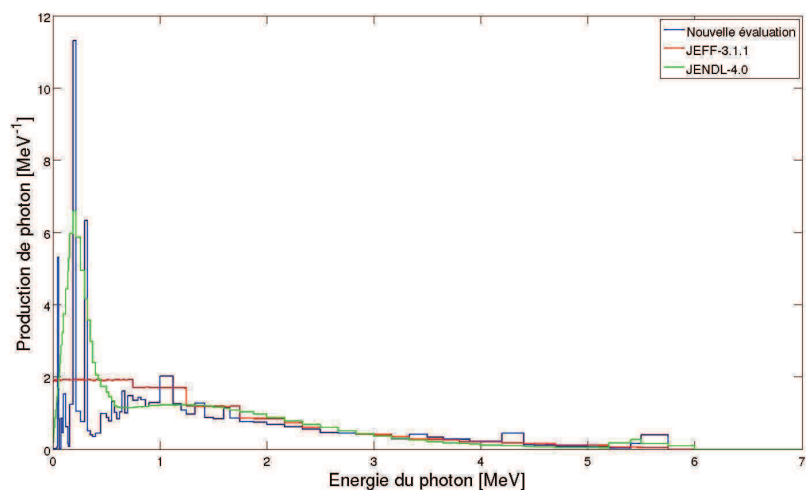


Figure B-10 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{178}\text{Hf}$  avec les autres évaluations

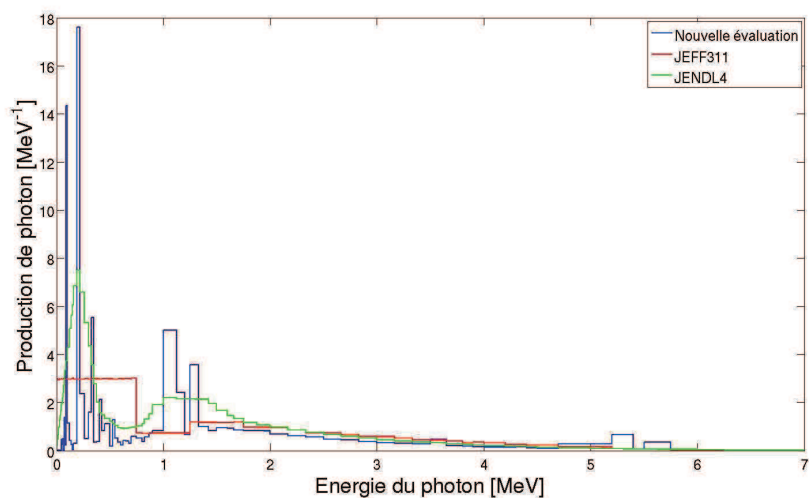


Figure B-11 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{179}\text{Hf}$  avec les autres évaluations

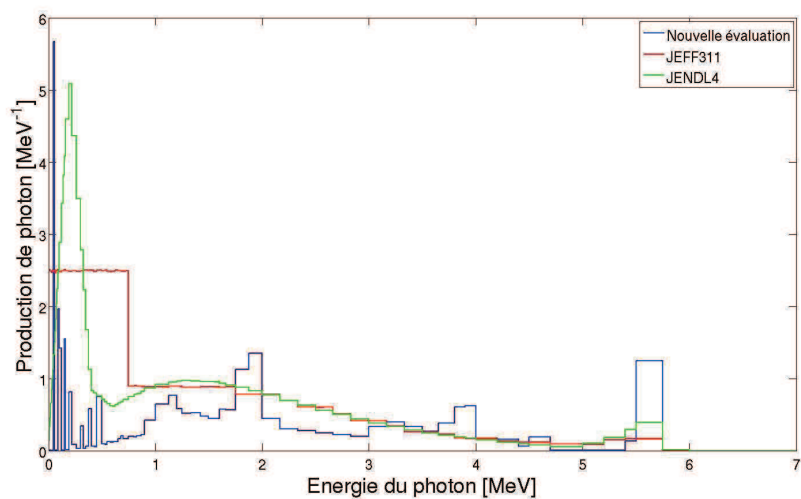


Figure B-12 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{180}\text{Hf}$  avec les autres évaluations

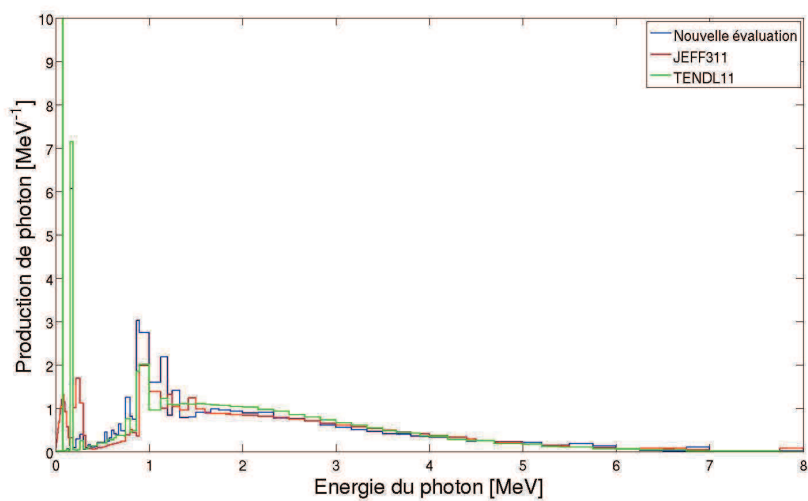


Figure B-13 Comparaison des nouveaux spectres de production de  $\gamma$  de capture radiative du  $^{157}\text{Gd}$  avec les autres évaluations



## Annexe C Enchaînement des modules APOLLO2 pour le calcul de l'échauffement $\gamma$

L'enchaînement des modules APOLLO2 qui va suivre ne concerne que le calcul du flux gamma avec la méthode des caractéristiques MOC. Cet enchaînement présuppose l'existence d'un certain nombre d'objets obtenus lors d'un calcul préliminaire du flux neutron :

- un objet géométrie que l'on notera TabStr.'GEO'
- un objet CALINIT contenant entre autres des informations sur les conditions aux limites que l'on notera TabStr.CALIN
- Un objet de tracking que l'on notera TabStr.'TRC'
- Un flux neutron normalisé ou non que l'on notera TabStr.'FLX'
- Une Apolib contenant les sections macroscopiques neutroniques que l'on notera TabStr.'APOLIB'
- L'adresse vers la bibliothèque de production photonique que l'on notera TabOpt.'ADR\_NGAM'
- L'adresse vers les bibliothèques gamma que l'on notera TabOpt.'ADR\_GAM'

Il existe une procédure APOLLO2 permettant de calculer le flux gamma nommée calflux\_gamma\_s. Cependant, elle ne semble pas fonctionner et de plus elle effectue un calcul de type Pij. Ce qui va suivre ne sera donc pas une procédure mais un enchainement de modules.

La première étape consiste à calculer les sources photoniques dans toutes les mailles élémentaires de la géométrie. Pour cela, nous utilisons le module A2SRCG. Celui-ci lit en entrée un flux neutronique modifié par le module AP2SAP et rend en sortie les sources gamma dans toutes les mailles élémentaires dans l'objet TabStr.'SOURCE GAMMA'.

```

TabStr.'MAT_FLUX'   =   AP2SAP: &EDIT 9 &FLUX      TabStr.'FLX'
                                TabStr.'CALIN'
                                TabStr.'GEO'          ;

TabStr.'SOURCE_GAMMA'
TabStr.'PARTIELS'
TabStr.'CUMUL'      =   A2SRCG: &EDIT 9

* .....
*                               source prompte uniquement
*                               &PROM
*                               source prompte et retardée
*                               &DELA
* .....
*                               sources: toutes
*                               &TOUT
*                               sources: capture uniquement
*                               &CAPT
*                               sources: fission uniquement
*                               &FISS
*                               sources: directe uniquement
*                               &MATR
*                               reactions possibles
*                               MATGA_10
*                               MATGA_16

```

```

*                                     MATGA_18
* .....
*                                     isotopes: exactement A,Z
*                                     &IAZ
*                                     isotopes: autour de A,Z
*                                     &NEAR
* .....
*                                     TabStr.'APOLIB'
*                                     TabStr.'MAT_FLUX'
*                                     TabStr.'GEO'
* .....
*                                     TabOpt.'ADR_NGAM'          ;

```

Ensuite, nous créons la macrolib gamma comme suit :

```

TabStr.'REPBIB_GAMMA' = OUVRIR: 'NOTRACE' 'LIEN' 96 'VARIABLE' 1024
                        3528 'ADRESSE' TabOpt.'ADR_GAM'      ;
TabStr.'BIBLI_GAMMA'  = LIREBIBL:      &EDIT 0
                        TabStr.'REPBIB_GAMMA'
                        &DIFF &P5
                        &TRAN &P5          ;

TabOpt.'VERS_BIB' = 'CEA2005';
TabOpt.'BIBLIO' = 4;
TabOpt.'IND_VERS' = 1;

TAB_ISO =      TABLE_ISOT 1      TabOpt.'VERS_BIB'
                        TabOpt.'BIBLIO' TabOpt.'IND_VERS'      ;

TabStr.'BIBLI_GAMMA' = BIBAZ:      &EDIT 1
                        &TABL TAB_ISO.'NOM_ISO'
                        TabStr.'BIBLI_GAMMA'
                        TabStr.'GEO'          ;

TabStr.'MAIL_GAMMA' = MAILLAGE:      TabStr.'BIBLI_GAMMA'      ;

TabStr.'MAC_GAMMA' = MACROLIB:      TabStr.'MAIL_GAMMA'
                        TabStr.'BIBLI_GAMMA'
                        TabStr.'GEO' &MAXI          ;

TabStr.'CAL_GAMMA' = CALINIT:      TabStr.'GEO'
                        TabStr.'MAC_GAMMA'          ;

```

La création de l'objet TAB\_ISO et son incorporation dans le module BIBAZ permet d'éviter un problème de correspondance entre les noms des isotopes naturels dans les bibliothèques neutrons et photons qui empêchait APOLLO2 de fonctionner.

L'étape suivante consiste à initialiser le flux gamma par les sources calculées par le module A2SRCG. Pour cela, nous passons par le module SOURCE puis par le module FLUX\_INIT qui doit être appelé deux fois.

```

TabStr.'SRC_GAMMA' = SOURCE:      TabStr.'CAL_GAMMA'
                        TabStr.'GEO'
                        &SEXT
                        TabStr.'SOURCE_GAMMA'      ;

TabStr.'FLUX_GAMMA' = FLUXINIT:      TabStr.'CAL_GAMMA'
                        TabStr.'MAC_GAMMA'
                        TabStr.'GEO'          ;

```

```

TabStr.'FLUX_GAMMA'      = FLUXINIT:      TabStr.'CAL_GAMMA'
                                TabStr.'MAC_GAMMA'
                                TabStr.'GEO'
                                TabStr.'TRC'
                                TabStr.'SRC_GAMMA'
                                TabStr.'FLUX_GAMMA'      ;

```

Enfin, nous pouvons effectuer le calcul MOC à proprement parlé avec le module CARFLUX.

```

cvg keff TabStr.'FLUX_GAMMA'
      = CARFLUX:      &EDIT 9
                        TabStr.'FLUX_GAMMA'
                        TabStr.'CAL_GAMMA'
                        TabStr.'MAC_GAMMA'
                        TabStr.'GEO'
                        TabStr.'TRC'      ;

```

Le flux gamma est contenu dans l'objet TabStr.'FLUX\_GAMMA'. A partir de celui-ci, il est possible de calculer le KERMA photon en utilisant le module EDITAUX sur une géométrie équivalente avec l'option &ENERGIE.





## Annexe D Validation du calcul P5 avec le code APOLLO2

La convergence numérique de la description angulaire de choc du solveur MOC est estimée par rapport à un calcul P5 supposé de référence. Afin de vérifier cette convergence, nous avons calculé et comparé les niveaux de flux gamma dans le réflecteur de PERLE en P0, P0 corrigé, P1, P3 et P5. Les résultats sont représentés sur les Figure D-1, Figure D-2, Figure D-3 et Figure D-4. Entre P0 et P5, les différences sur le niveau de flux photonique peuvent dépasser 10%. C'est écart est réduit à quelques % avec les calculs en P0 corrigé et en P1. Les différences avec le calcul en P3 ne dépassent plus 0.4%. Il est donc légitime de considérer qu'un calcul en P5 est convergé à moins de 0.4%. Il n'est donc pas utile de discrétiser les sections efficaces en angle à un ordre supérieur à 5.

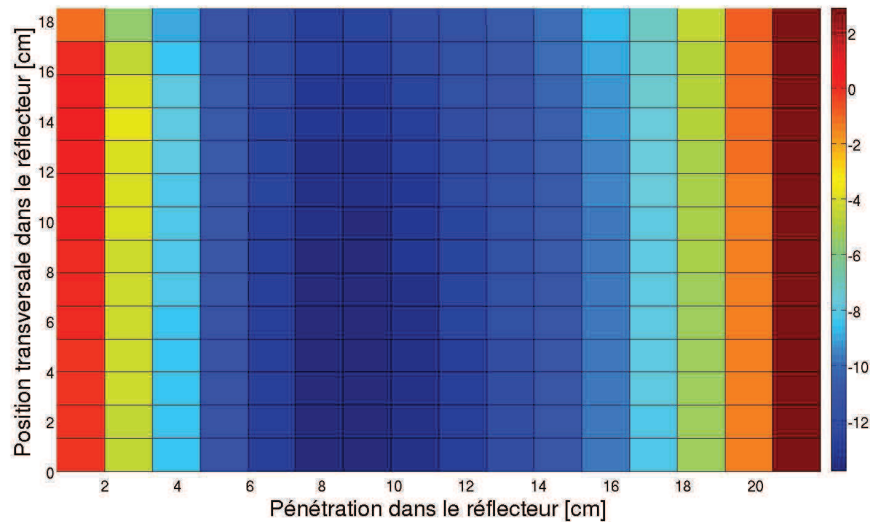


Figure D-1 Différence sur les niveaux de flux photoniques dans le réflecteur de PERLE pour deux calculs APOLLO2 en P0 et P5 ( $A2\_P0/A2\_P5-1$ ) [%]

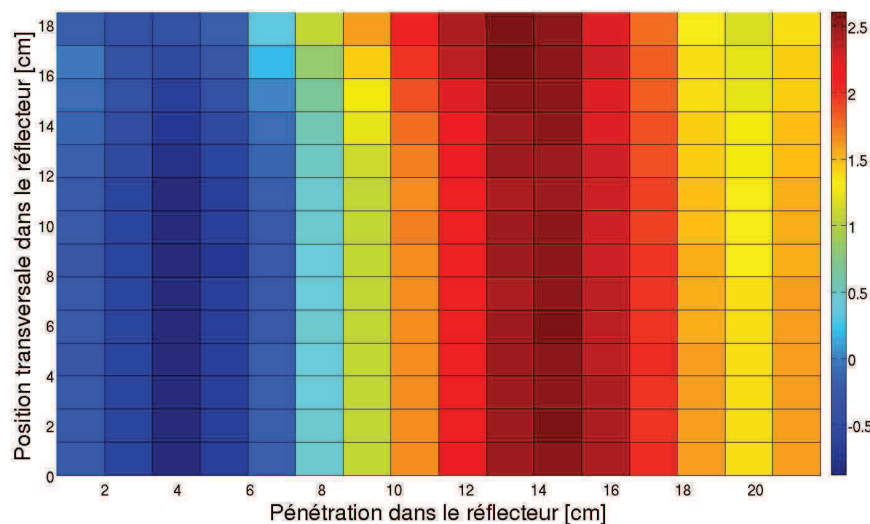


Figure D-2 Différence sur les niveaux de flux photoniques dans le réflecteur de PERLE pour deux calculs APOLLO2 en P0c et P5 ( $A2\_P0c/A2\_P5-1$ ) [%]

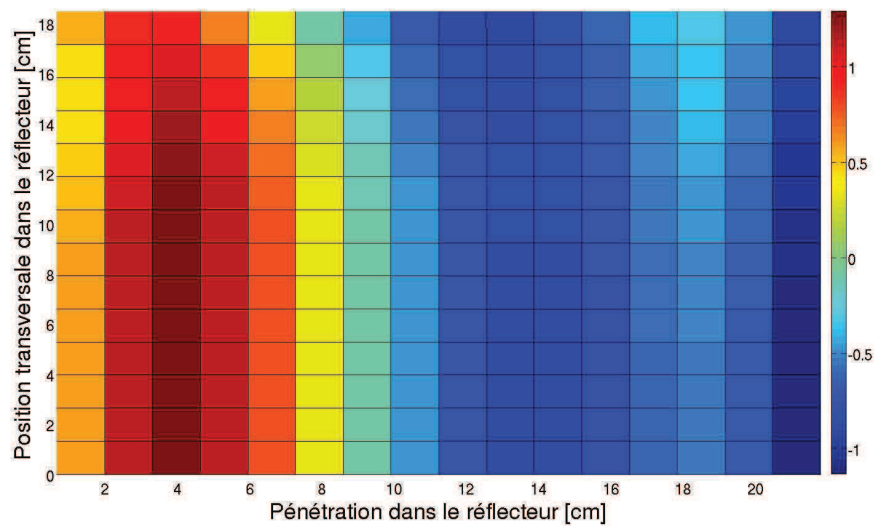


Figure D-3 Différence sur les niveaux de flux photoniques dans le réflecteur de PERLE pour deux calculs APOLLO2 en P1 et P5 ( $A2\_P1/A2\_P5-1$ ) [%]

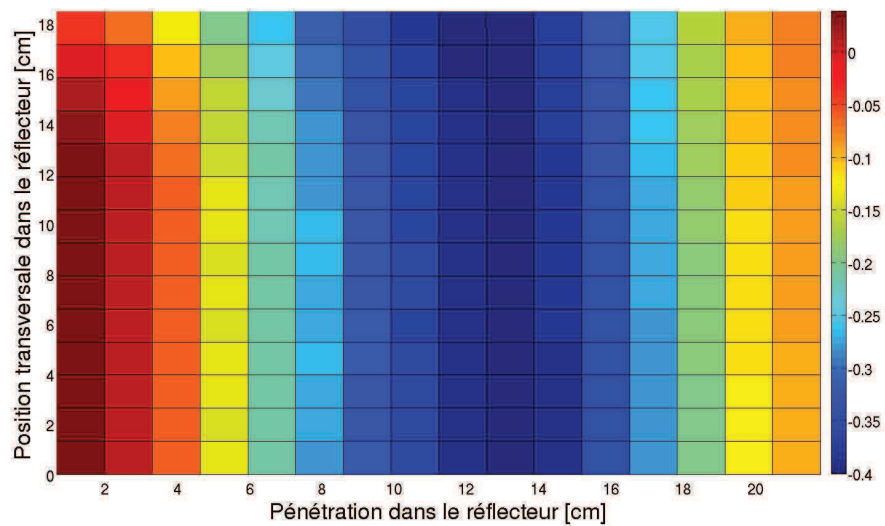


Figure D-4 Différence sur les niveaux de flux photoniques dans le réflecteur de PERLE pour deux calculs APOLLO2 en P1 et P5 ( $A2\_P3/A2\_P5-1$ ) [%]

## Annexe E Publications

### Publication pour la conférence PHYTRA2

*PHYTRA 2 – The Second International Conference on Physics and Technology of Reactors and Applications*  
Fes, Morocco, September 26-28, 2011, on CD-ROM, GMTR, Rabat, Morocco (2011)

#### New evaluation of photon production for JEFF3

S. Ravaux and D. Bernard  
CEA, DEN, DER, Cadarache  
F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance, France.  
simon.ravaux@cea.fr; david.bernard@cea.fr

A. Santamarina  
CEA, DEN, DER, Cadarache  
F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance, France.  
alain.santamarina@cea.fr

#### ABSTRACT

In this work, we propose new gamma production evaluations for JEFF3 for crucial nuclei in power reactors and Jules Horowitz Reactor: Fe, Ag, In, Cd and Gd. We specifically work on two nuclear reactions: the inelastic scattering and the radiative capture. We have performed gamma production multiplicities, angular distributions and energy spectrum for incident neutron energies between  $10^{-11}$  and 20 MeV by simulating the whole intranuclear gamma cascade. For this simulation, the discrete part of the nuclei level schemes came from the RIPL2.0 library and the latest EGAF measurements carried out at Budapest facility. The EGAF measurements are available in the adopted IAEA library. The continuum level scheme part has been estimated with a level density model: the Gilbert-Cameron model and a strength function model: the Generalized Lorentzian model. Then, the gamma cascade has been simulated using TALYS which is a nuclear reaction modeling code.

*Key Words:* gamma, nuclear, radiative capture, inelastic scattering, TALYS

#### 1. INTRODUCTION

The local energy photon deposit must be accounted accurately for advanced light-water nuclear reactor and the new experimental Jules Horowitz Reactor[1] (JHR). The nuclear data library JEFF3.1.1[2] contains most of the photon production data. However, we found some nuclei for which there are missing or erroneous data which need to be completed or modified. In this work, we propose new gamma production evaluation for JEFF3.

Most of the gamma production in a nuclear reactor comes from neutron interactions with matter: inelastic scattering, fission, radiative capture and all other neutron-induced-nuclear reactions except for elastic scattering. We focus on inelastic scattering and radiative capture, respectively MT50+i or MT91 (with  $i$  the discrete level number and 91 the continuum) and MT102 in the ENDF format[3]. We identified six crucial nuclei for the JHR and power reactor with missing or wrong data: Fe, Ni, Ag, In, Cd and Gd. We study each stable isotope of these elements.

Information on the gamma emission spectrum following a radiative capture are available in the EGAF[4] measurements performed at the Budapest facility or in the nuclear structure data



library ENSDF[5]. However, none of them can allow us to account for the continuous part of the gamma spectrum. This is pointed out by Figure 1 that compares the integrated discrete photon energy ( $Q_\gamma = \sum E_i I_i$ ) using AIEA or ENSDF data sets to the actual energy emission ( $B_\gamma$ ) for radiative neutron capture. We can observe that for heavy nuclei ( $A > 70$ ) neither EGAF nor ENSDF dissipate the entire available gamma energy. So the continuum part must be taken into account by simulation. TALYS[6] is a nuclear reaction code developed by NRG and the CEA/DAM which will be used in this study.

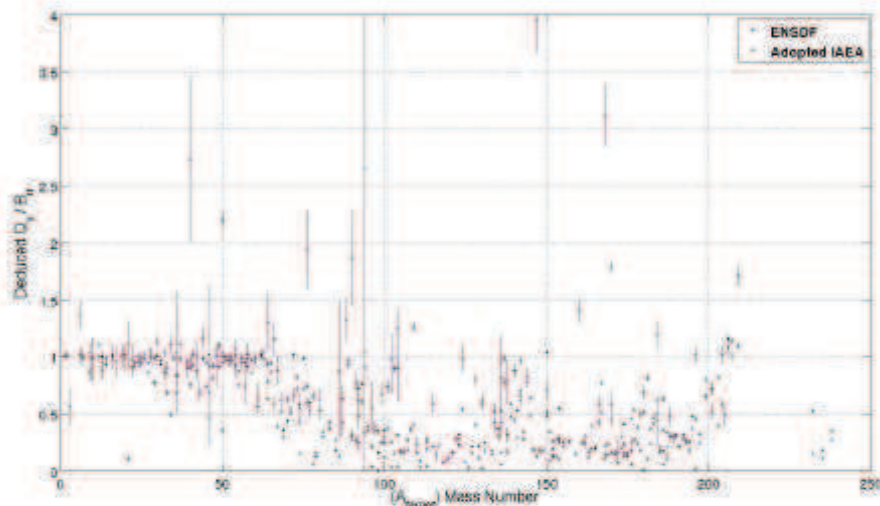


Figure 1. Comparison between the integrated gamma energy from radiative capture evaluations and  $B_\gamma$ .

## 2. PHOTON PRODUCING REACTION IN THE PERLE EXPERIMENT

### 2.1. The PERLE experiment

Calculations were carried out to interpret an integral experiment called PERLE[7] performed in the zero-powered EOLE facility at CEA Cadarache. It is a regular PWR-type core, with 3.7% enriched  $\text{UO}_2$  pins in a 1.32cm square pitch, surrounded by a 22cm-thick stainless steel reflector. Some TLDs have been inserted inside the reflector to measure the gamma KERMA. One of the PERLE purpose is to estimate the local gamma heating in a heavy reflector for the 3<sup>rd</sup> generation reactors. Preliminary reaction rate calculations have been performed with the latest version of the Monte Carlo neutron transport code TRIPOLI4.7[8] which is developed by the CEA. The results are given on Tables 1 to 5. The PERLE core simulation with TRIPOLI4.7 is shown on Figure 2.

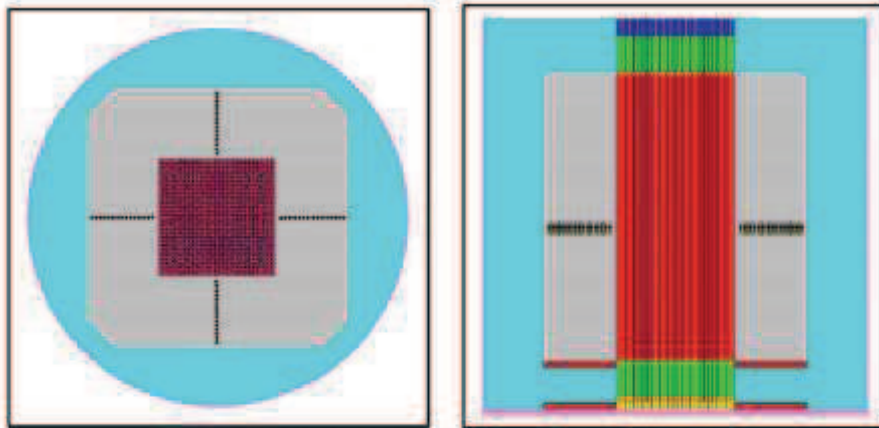


Figure 2. The PERLE core simulated by TRIPOLI4.7

We compared the main photon producing reaction rates in the fuel assembly and in the stainless steel reflector of the core.

Table 1. Reaction rates in the stainless steel reflector of the PERLE experiment

Reaction	Reaction rate [%]
Inelastic discrete	54.9
Inelastic continuous	2.0
Radiative capture	43.1
Total	100

Table 2. Reaction rates in the fuel assembly of the PERLE experiment

Reaction	Reaction rate [%]
Inelastic discrete	17.6
Inelastic continuous	7.6
Radiative capture	29.2
Fission	45.6
Total	100

We can observe that the inelastic scattering and the radiative capture are equally important. The photon production must be known as accurately as possible for nuclear reactor calculations.

Table 3 presents the radiative capture and the inelastic scattering reaction rates for Ni, Cr and Fe in the PERLE stainless steel reflector. The reaction rates are normalized to the  $^{56}\text{Fe}$  results. The inelastic scattering on radiative capture ratio of  $^{56}\text{Fe}$  is 1.52.

**Table 3. Comparaison between inelastic scattering and radiative capture rates in the PERLE stainless steel reflector**

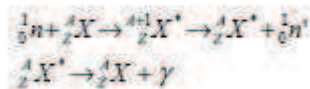
Nucleus	Concentration [ $10^{-24} \text{ cm}^{-3}$ ]	Inelastic scattering reaction rate [%]	Radiative capture reaction rate [%]	$B_n$ [MeV]
$^{54}\text{Fe}$	$3.51.10^{-3}$	3.10	6.21	9.298
$^{56}\text{Fe}$	$5.52.10^{-2}$	100	100	7.646
$^{57}\text{Fe}$	$1.27.10^{-3}$	25.04	2.59	10.044
$^{58}\text{Fe}$	$1.70.10^{-4}$	0.44	0.25	6.580
$^{50}\text{Cr}$	$7.11.10^{-4}$	1.62	7.75	9.260
$^{52}\text{Cr}$	$1.37.10^{-2}$	16.10	9.26	7.939
$^{53}\text{Cr}$	$1.55.10^{-3}$	0.37	18.95	9.719
$^{54}\text{Cr}$	$3.87.10^{-4}$	0.83	0.13	6.246
$^{58}\text{Ni}$	$4.52.10^{-3}$	3.61	15.38	8.999
$^{60}\text{Ni}$	$1.74.10^{-3}$	1.93	3.76	7.820
$^{61}\text{Ni}$	$7.57.10^{-5}$	0.70	0.17	10.596
$^{62}\text{Ni}$	$2.41.10^{-4}$	0.28	2.25	6.837
$^{64}\text{Ni}$	$6.16.10^{-5}$	0.05	0.07	6.098
$^{55}\text{Mn}$	$1.62.10^{-3}$	8.45	19.39	7.270

Table 3 demonstrates that  $^{56}\text{Fe}$  is the most important nucleus. However 25% and 16% of the inelastic scattering are due respectively to  $^{57}\text{Fe}$  and  $^{52}\text{Cr}$ . Moreover  $^{54}\text{Fe}$ ,  $^{50}\text{Cr}$ ,  $^{52}\text{Cr}$ ,  $^{53}\text{Cr}$ ,  $^{58}\text{Ni}$  and  $^{55}\text{Mn}$  are significant for the radiative neutron capture.

Currently, in JEFF3.1.1, the photon production data of Fe nuclei are wrong. The gamma emission energy of  $^{54}\text{Fe}$ ,  $^{57}\text{Fe}$  and  $^{58}\text{Fe}$  is more than 50% underestimated (as seen later in Figure 5). On the other hand, for  $^{56}\text{Fe}$ , it is respectively 1, 2 and 40 MeV higher than expected for the 1, 5 and 20 MeV radiative capture.

## 2.2. The Inelastic Scattering

The inelastic scattering on a target nucleus  $^A_Z X$  can be described as follow:





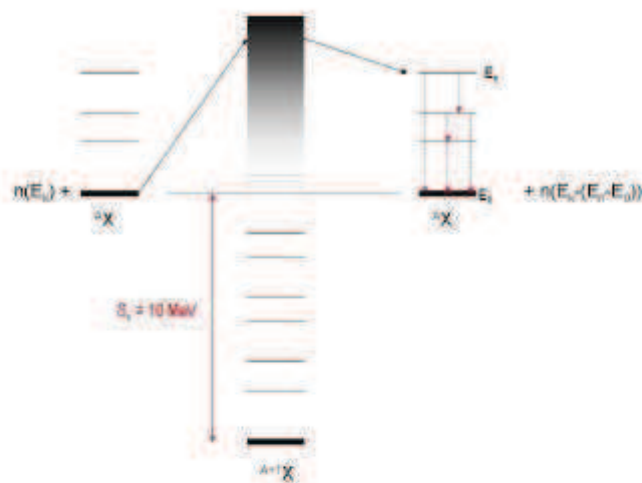


Figure 3. The inelastic scattering scheme

The total gamma emitted energy corresponds to the energy  $E_n - E_0$  (or  $E_n - E_m$  if there is a metastable state) on Figure 3. Two kinds of inelastic scattering can be distinguished. For lower neutron energy, only a few well-known levels are excited. The gamma decay spectrum from these levels is easily deduced from the level scheme of the residual nucleus (which is also the target nucleus). It is discrete and it does not depend on the incident neutron energy. When the neutron energy is sufficiently high, the residual nucleus excited state cannot be accurately defined. Consequently, a statistic nuclear model which depends on the incident neutron energy must be used to calculate the gamma emission spectrum. This model needs level densities and transmission coefficient to simulate the gamma decay. Contrary to the discrete scattering spectra, the continuum scattering spectra have a continuous part.

Table 4 and 5 compare the inelastic reaction rates on the first to the fifth discrete level and on the continuum for  $^{56}\text{Fe}$  and  $^{57}\text{Fe}$ . The results come from the TRIPOLI4.7 interpretation of PERLE.

Table 4. Comparison of the  $^{56}\text{Fe}$  inelastic reaction rates

Inelastic scattering reaction	Reaction rate [%]	Level energy [MeV]
Total	100	
1 <sup>st</sup> level	82.40	0.86
2 <sup>nd</sup> level	3.23	2.12
3 <sup>rd</sup> level	2.96	2.71
4 <sup>th</sup> level	0.59	3.00
5 <sup>th</sup> level	1.45	3.01
continuum	2.59	>4.61



Table 5. Comparison of the  $^{57}\text{Fe}$  inelastic reaction rates

Inelastic scattering reaction	Reaction rate [%]	Level energy [MeV]
Total	100	
1 <sup>st</sup> level	63.11	0.01
2 <sup>nd</sup> level	15.28	0.14
3 <sup>rd</sup> level	10.89	0.37
4 <sup>th</sup> level	3.88	0.72
5 <sup>th</sup> level	0.80	1.02
continuum	1.40	>2.37

We can observe that the continuum contribution to inelastic scattering is small. Therefore, most of the emitted gammas have energies lower than 1 MeV. So, the inelastic scattering part of the photon production is small compared to the radiative capture as seen after.

### 2.3. The Radiative Capture of the Neutron

The radiative capture of the neutron on a target nucleus  $^A_ZX$  can be described as follow within the compound nucleus process:

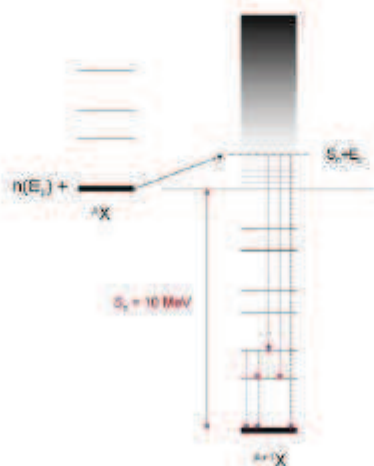


Figure 4. The radiative capture scheme

The Q-value of the radiative capture reaction is between 6 and 12 MeV. So, the gamma emission spectrum is more energetic than in the inelastic scattering. The gamma cascade is described in two ways depending on the excited state energy  $E_x$  during the decay of the compound nucleus.

The cutoff energy  $E_c$  separates the two possible ways. If  $E_s \leq E_c$ , the compound nucleus level scheme is complete, all the discrete level energies and the transition probabilities are well-known. The gamma cascade is easily deduced from the excited state as for the discrete inelastic scattering. If  $E_s \geq E_c$ , the level scheme is incomplete, some levels are missing and transition probabilities are not systematically associated to each tabulated discrete levels. The energy  $S_n + E_k$ , which is the energy of the excited state at the beginning of the gamma cascade, is always larger than  $E_c$ . So, except if, as seen on Figure 1, all the gamma energy is described in a discrete spectrum, we always need to use a nuclear model as for the continuum inelastic scattering to simulate the gamma cascade from  $E_s$  to a well known discrete level.

### 3. TWO NUCLEAR MODELS

#### 3.1. A level density model: The Gilbert-Cameron model

The GCM[9] model has been proposed by A. Gilbert and A. G. W. Cameron in 1965. It is a mix between two other level density models: a Fermi Gas model (FGM) like and the Constant Temperature model (CTM). The energetic domains of each model are delimited by a matching energy  $E_M$ . Below  $E_M$  the CTM is used and belong  $E_M$ , it is the FGM. Whatever the used model is, the spin-parity-dependent level density  $\rho(E, J, \Pi)$  can be expressed as a function of the total level density  $\rho(E)$ :

$$\rho(E, J, \Pi) = \frac{1}{2} \frac{2J+1}{2\sigma^2} \exp\left[-\frac{\left(J + \frac{1}{2}\right)^2}{2\sigma^2}\right] \rho(E)$$

For  $E_s \geq E_M$ , the level density is described by the BSFGM as follow :

$$\rho_s(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{\exp[2\sqrt{aU}]}{a^{1/4}U^{3/4}}$$

$\sigma^2$  is the spin cutoff which characterizes the spin dispersion,  $a$  is the density parameter and  $U$  is the effective excitation energy accounting for the nucleon coupling.  $\sigma^2$  can be obtained by fitting to the known level scheme or with a systematic expression.

An energy dependent expression for the level density parameter  $a$  was given by Ignatyuk[10]:

$$a(E, Z, A) = \tilde{a}(A) \left\{ 1 + \frac{\delta W}{U} [1 - \exp(-\gamma U)] \right\}$$



$\delta W$  is the shell correction energy which become less and less important as the excitation energy increases.  $\gamma$  is the damping parameter which determines how rapidly  $a(E, Z, A)$  approaches  $\tilde{a}(A)$ .  $\tilde{a}(A)$  is the asymptotic value of  $a$  when there is no shell effects. These three parameters can be obtained using systematic expressions but  $\tilde{a}(A)$  can also be fitted to the well-known level scheme and the s-wave level spacing at the neutron separation energy  $D_0(S_n)$ .

For  $E_x \leq E_M$ , the level density is described by the CTM as follow :

$$\rho_f(E) = \frac{1}{T} \exp[(E - E_0)/T]$$

$E_0$  and  $T$  are two models parameters with the same dimension as an energy. These parameters and  $E_M$  can be determined using the continuity of the level density function and its first derivative.

$$\begin{aligned} \rho_f(E_M) &= \rho_f(E_M) \\ \left. \frac{d\rho_f}{dE} \right|_{E_M} &= \left. \frac{d\rho_f}{dE} \right|_{E_M} \end{aligned}$$

A third equation is needed to solve this problem with three unknown quantities. It can be obtained by integrating the level density in the well-known level scheme energies or taking systematic expressions of  $T$  or  $E_M$ .

### 3.2. A strength function model: The generalized lorentzian model

The strength functions are useful to describe the transition probabilities between an excited nucleus level to another. The transmission coefficient for a multipolarity  $l$  of type X is given by :

$$T_X(E_\gamma) = 2\pi \tilde{f}_X(E_\gamma) E_\gamma^{2l+1}$$

$\tilde{f}_X(E_\gamma)$  is the gamma strength function.

We use the Generalized Lorentzian Model (GLO) as advised by Kopecky-Uhl[11].

$$\tilde{f}(E_\gamma, T) = 8.674 \cdot 10^{-8} \sigma_r \Gamma_r \left[ \frac{E_\gamma \Gamma_k(E_\gamma, T)}{(E_\gamma^2 - E_r^2)^2 + E_\gamma^2 \Gamma_k^2(E_\gamma, T)} + \frac{0.7 \Gamma_k(E_\gamma = 0, T)}{E_\gamma^3} \right]$$

$E_r$ ,  $\sigma_r$ , and  $\Gamma_r$  are respectively the energy, the cross section and the width of the giant dipole resonance (GDR) peak. They are the GDR parameters. The first term corresponds to an energy

dependent Lorentzian model and the second term is a correction for the small energy gamma.  $\Gamma_k$  is an energy-dependent GDR width correction.  $T$  is the nuclear temperature.

The GDR parameters have been only measured for an E1 transition. So, only systematic values can be used for all the other multiplicities.

#### 4. RESULTS : The $^{54}\text{Fe}$ case

The calculations have been performed with the nuclear reaction code TALYS. This code is currently developed by NRG and the CEA/DAM. All the formulae presented before are included in TALYS. TALYS has his own nuclear structure library which is inspired from RIPL2.0[12]. The missing data in RIPL2.0 (level spin and parity, branching ratio) have been completed. The IAEA proposes another nuclear structure library based on the latest measurements performed at the Budapest facility EGAF and the ENSDF library. We accounted for this new evaluation by creating a new library mixing the IAEA adopted files and the original TALYS structure files. All the gamma spectrum calculations have been performed with the original TALYS files and our TALYS/EGAF mixed files.

The  $^{54}\text{Fe}$  results are presented as an example and are compared with the actual JEFF3.1.1 version. Figure 5 shows the total gamma emission energy after a radiative capture in JEFF3.1.1 and in the TALYS evaluations. Figure 6 represents the discrete gamma emission spectrum and Figure 7 the continuous. The calculations have been made with thirty discrete levels above the ground state. It corresponds to about sixty discrete gamma rays.

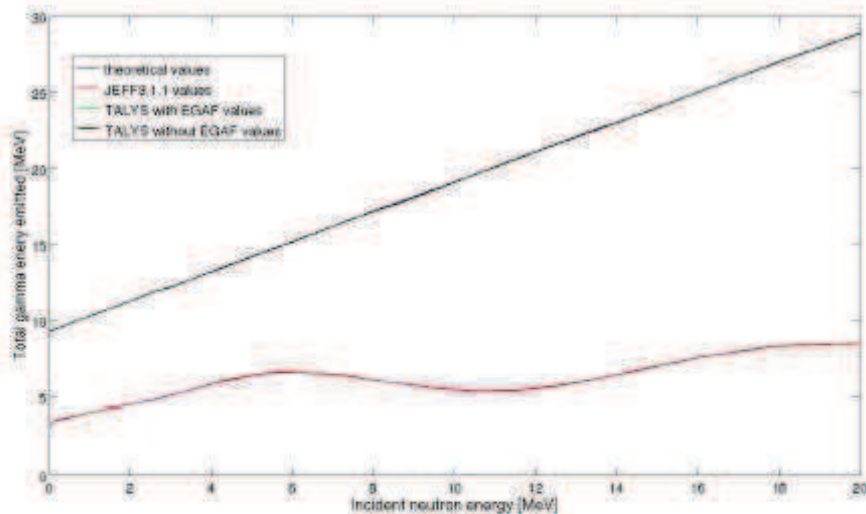


Figure 5. Integrated gamma emission spectra after a radiative neutron capture by  $^{54}\text{Fe}$

Figure 5 points out that the gamma production spectrum of JEFF3.1.1 was more than 50 % wrong with respect to the total energy conservation. In the PERLE experiment, the  $^{54}\text{Fe}$  represents 4% of the neutron radiative capture. The JEFF3.1.1 error on this nucleus



approximately generates a 2% bias on the total gamma production in the stainless steel reflector and consequently a bias on the gamma heating calculations. Now, the new gamma spectrum is matching the expected total gamma energy curve from 1 keV to 20 MeV incident neutron energy.

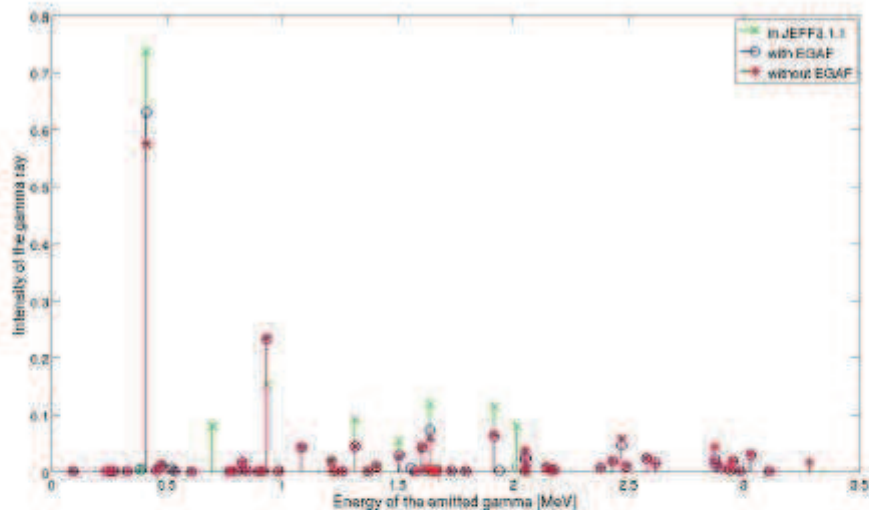


Figure 6. Discrete gamma emission spectra after a 2keV radiative neutron capture of  $^{54}\text{Fe}$

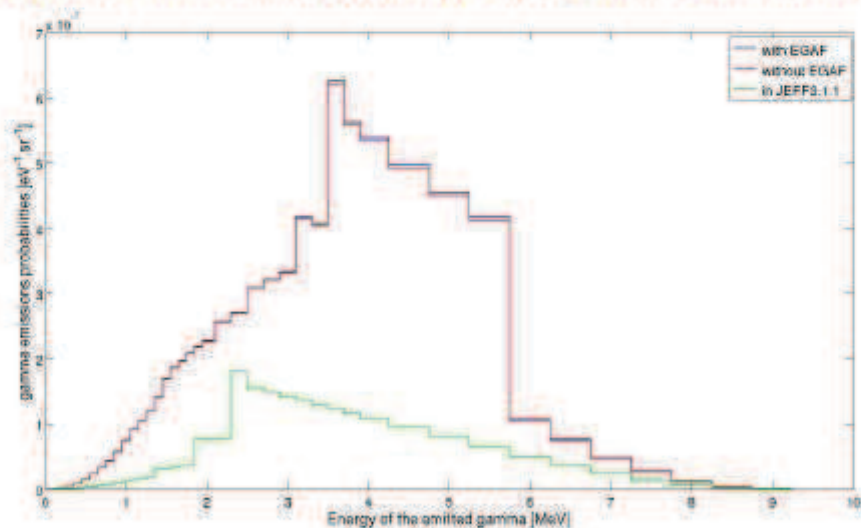


Figure 7. Continuous gamma emission spectra after a 2keV radiative neutron capture of  $^{54}\text{Fe}$

Figure 6 shows that the discrete spectrum accounts for more discrete levels in the new TALYS-based evaluation than in JEFF3.1.1. We could account for even more discrete levels.

The JEFF3.1.1 continuous spectrum is very small compared to the new spectrum, so the energy problem of JEFF3.1.1 is corrected. The continuous spectrum shape difference between TALYS and JEFF3.1.1 is due to the higher energy of the latest accounted gamma with TALYS.

There are few differences between the discrete gamma spectrum with and without EGAF: about 10% on the 411 keV peak, 26% on the 1.64 MeV and 51% on the 2.873 MeV. The continuous gamma spectrum with EGAF is less than 1% different from the other. We can deduce that except for a few discrete gamma peaks, there is no significant difference between the two TALYS generated spectra.

On Figure 8, we show the discrete gamma spectrum from the EGAF measurement in the IAEA database. This spectrum is obtained after a thermal neutron capture.

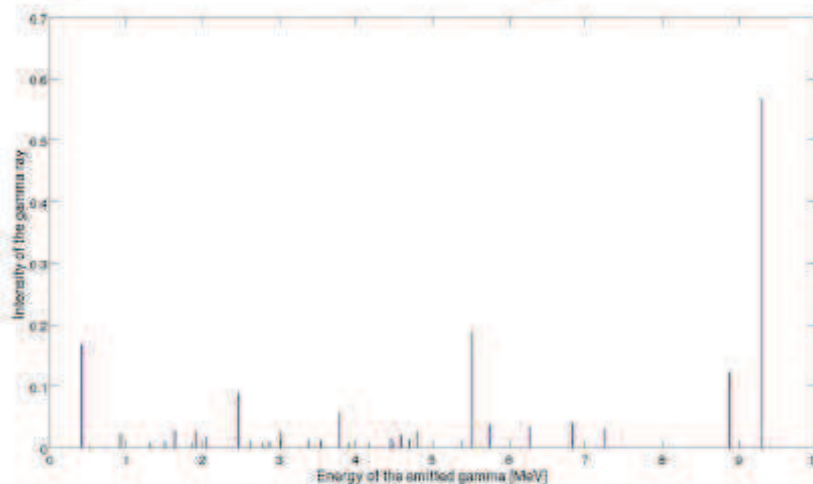


Figure 8. Discrete gamma emission spectrum in the adopted IAEA database for the  $^{54}\text{Fe}$

As seen on Figure 1, the total energy of this spectrum is equal to the reaction Q-value. It means that all the available energy is dissipated and consequently that there is no needed continuum part for this spectrum. EGAF is sufficient to describe the whole gamma spectrum for thermal neutron capture. So, we decided that for less than 1 keV neutron radiative capture, we would put directly the EGAF measurement in the gamma production evaluations. This method cannot be processed for all the nuclei because EGAF does not systematically dissipate the entire available energy. Each nucleus must be checked separately.

We obtained similar results for the other studied nuclei. Hence, gamma heating should be more accurately predicted.

## 5. CONCLUSION AND PERSPECTIVES

The photon production knowledge is becoming a very important issue. The JEFF3.1.1 library which is very efficient for the neutron transport calculation[13][14], needs improvements for this



new problematic. Thus, we produced new gamma production spectrum for some nuclei using the TALYS code. It appeared that the new evaluations are coherent, and account for more known discrete levels than in JEFF3.1.1.

We used two nuclear structure library accounting or not for the latest EGAF measurements and we did not observe significant differences between the spectra obtained with each library. Only a few discrete peaks are more than 10% percent different. The continuous spectra are similar by more than 99%. For less than 1 keV neutron radiative capture, the discrete gamma spectrum of the IAEA database could be enough and be directly put without any change in the evaluation.

All these new data will be used to interpret the PERLE experiment. They will be useful for all the gamma KERMA calculation.

### ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge Dr Arjan Koning from NRG for his help in TALYS using. The authors also thank EDF and Areva for their financial support.

### REFERENCES

1. C. Döderlein, "3D neutronics scheme for the development of the Jules-Horowitz-Reactor", *Conf. PHYSOR2008 "Nuclear Power: A Sustainable Resource"*, Switzerland, Sept 14-19, 2008
2. A. Santamarina, "The JEFF3.1.1 nuclear library", JEFF Report 22, OECD, 2009.
3. "ENDF-6 Formats Manual", CSEWG Document ENDF-102, *Report BNL-90363-2009 Rev. 1*, <http://www.nndc.bnl.gov/csewg/docs/endl-manual.pdf> (2009).
4. "Database of prompt gamma rays from slow neutron capture for elemental analysis", [http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/Pub1263\\_web.pdf](http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/Pub1263_web.pdf), IAEA, Vienna (2007).
5. Jag Tuli, "Evaluated nuclear structure data files", <http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>.
6. C. Vaglio-Gaudard et al., "Interpretation of the PERLE experiment for the Validation of Iron Nuclear Data Using Monte Carlo Simulation", *Nucl. Sci. and Eng.*, 166, pp. 89-106 (2010).
7. A. J. Koning, S. Hilaire, M. Duijvestijn, "TALYS-1.2, a nuclear reaction program, user manual", <http://www.talys.eu/fileadmin/talys/user/docs/talys1.2.pdf>, (2009).
8. E. Brun, "Overview of TRIPOLI-4© version 7 Continuous-energy Monte Carlo Transport Code", *Proceedings of ICAPP 2011*, Nice, May 2-5, 2011.
9. A. Gilbert, A. G. W. Cameron, "A Composite Nuclear-Level Density Formula with Shell Corrections", *Canadian journal of physics*, Vol 43, pp. 1446-1496 (1965).
10. A. V. Ignatyuk, "Phenomenological description of the energy dependence of the level density parameter", *Iad. Fiz 21*, pp.485-490, 1975, (in Russian).
11. J. Kopecky, M. Uhl, "Test of gamma-ray strength functions in nuclear reaction model calculations", *Physical Review C*, Volume 41, Number 5, pp. 1941-1955 (1990).
12. "Handbook for calculations of nuclear reaction data, ripl-2", *IAEA-TECDOC-1506*, <http://www-nds.iaea.org/ripl2/handbook/ripl2.pdf> (2006).
13. A. Santamarina et al., "APOLLO2.8 : a validated package for accurate LWR calculations", *Int. Conf. on Fuel Management ANFM-IV*, Hilton Head Island (USA), April 12-15, 2009.
14. E. Martinolli et al., "APOLLO2-A – AREVA's New Generation Lattice Physics Code : Methodology and Validation", *Conf. PHYSOR2010*, Pittsburgh, May 9-14, 2010.



## New evaluation of photon production for JEFF-3

S. Ravaux<sup>1</sup>, D. Bernard<sup>1</sup>, A. Santamarina<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CEA, DEN, DER, Cadarache, F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance, France.

**Abstract.** In this work, new gamma production evaluations are proposed for JEFF-3 for crucial nuclei for power reactors and Jules Horowitz Reactor: Fe, Ag, In, Cd and Gd. We specifically work on two nuclear reactions: the inelastic scattering and the radiative capture. We performed gamma production multiplicities, angular distributions and energy spectrum for incident neutron energies between  $10^{-11}$  and 20 MeV by simulating the whole intranuclear gamma cascade. For this simulation, the discrete part of the nuclei level schemes came from the RIPL2.0 library and the latest EGAF measurements carried out at Budapest facility. The EGAF measurements are available in the adopted IAEA library. The continuum level scheme part has been estimated with a level density model: the Gilbert-Cameron model and a strength function model: the Generalized Lorentzian model. Then, the gamma cascade has been simulated using TALYS which is a nuclear reaction modeling code.

## 1. INTRODUCTION

The local energy photon deposit must be accurately accounted for advanced light-water nuclear reactor and the new experimental Jules Horowitz Reactor [1] (JHR). The nuclear data library JEFF-3.1.1 [2] contains most of the photon production data. However, we found some nuclei with missing or erroneous data which need to be completed or modified. In this work, we propose new gamma production evaluation for JEFF-3.

Most of the gamma production in a nuclear reactor comes from neutron interactions with matter: inelastic scattering, fission, radiative capture and all other neutron-induced-nuclear reactions except for elastic scattering. We focus on the radiative capture (MT102 in the ENDF format [3]) which is energetically predominant on the inelastic scattering for the  $\gamma$  emission. 6 crucial nuclei have been identified for the JHR and power reactor with missing or wrong data: Fe, Ni, Ag, In, Cd and Gd. Each natural isotope of these elements has been studied.

## 2. PROCESSING OF NEW GAMMA PRODUCTION SPECTRA

### 2.1. Experimental measurements: the EGAF library

EGAF [4] is an online library validated by the AIEA. It contains gamma production spectra due to a neutron capture. All these spectra are evaluated with well known data from the ENSDF [5] library

and new measurements partly performed with a thermal neutron beam at Budapest facility. They only contain discrete gamma production peak without accounting for a continuous part. This is pointed out by Figure 1 that compares the integrated discrete photon energy using AIEA or ENSDF data sets to the actual energy emission ( $B_\gamma$ ) for thermal-neutron-radiative capture. For heavy nuclei ( $A > 70$ ) neither EGAF nor ENSDF dissipate the entire available gamma energy. In other terms, the continuum part must be taken into account by simulation.

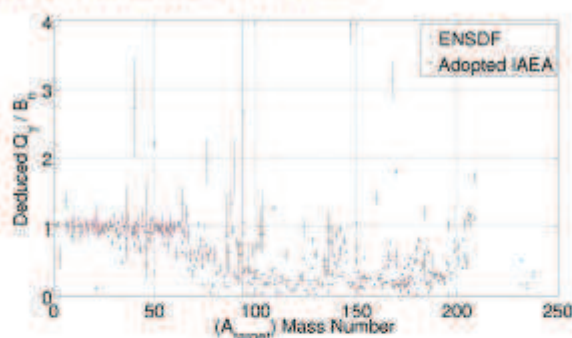


Fig. 1. Comparison between the integrated discrete gamma energy from radiative capture evaluations and  $B_\gamma$ .

## 2.2. A modeling code: TALYS

TALYS [6] is a nuclear reaction modeling code developed by NRG and the CEA/DAM. It can model the gamma cascade after a radiation capture for many incident neutron energies by a Hauser-Feshbach decay with a strength function and a level density model. The chosen models are the Generalized Lorentzian and the Gilbert-Cameron composite model as advised by Kopecky and Uhl [7]. TALYS can account for the first well known discrete levels, which are available in the RIPL2.0 [8] database. So the resulting spectra, after a TALYS calculation, contain both a discrete and a continuous part.

## 2.3. Processing of new ENDF evaluation for JEFF3.2

The new spectra, which are proposed for JEFF3.2, are divided in two parts. For incident neutron energies fewer than 1 keV, it means around 90% of the neutron capture in steel, the spectra contains the EGAF-discrete peaks and a continuous part calculated by TALYS if needed. Above 1 keV, the spectra are fully calculated with TALYS [9].

# 3. EFFECT OF THE NEW EVALUATIONS

## 3.1. Shape of the new spectra

TRIPOLI [10] calculations of a given thermal neutron source in an infinite medium give the following photon production spectra. The energy mesh contains 94 groups from  $10^{-11}$  to 20 MeV. The results are shown in figure 2 for 4 nuclei:  $^{54}\text{Fe}$ ,  $^{56}\text{Fe}$ ,  $^{177}\text{Hf}$ ,  $^{180}\text{Hf}$ .



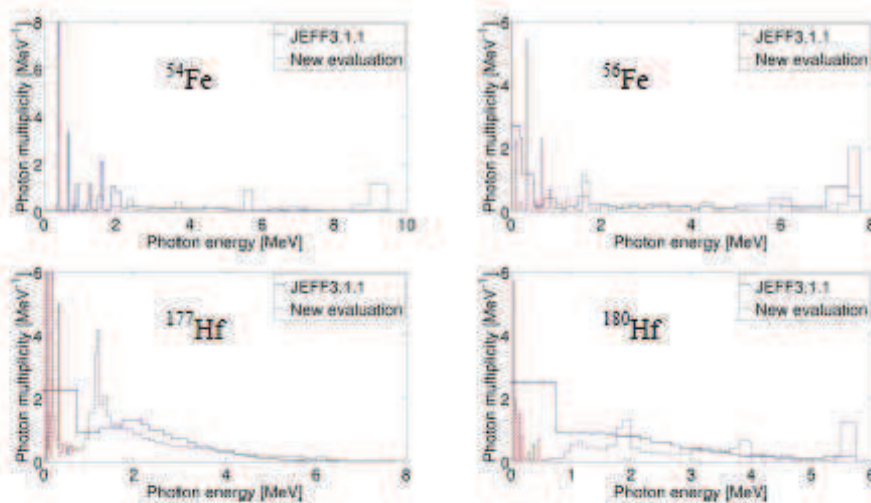


Fig. 2. Photon production spectra after a thermal neutron capture

The new gamma production spectra are more accurate and account for more discrete peaks. In the case of the  $^{54}\text{Fe}$ ,  $^{177}\text{Hf}$  and  $^{180}\text{Hf}$ , no high-energy-primary-gamma peak was present in JEFF-3.1.1.

### 3.2. Effect of the new spectra on the local energy deposition

The new gamma production spectra must affect the photon transport and consequently the local energy deposition. A 10cm-sphere, divided in 10 1cm-long shells with a thermal capture on  $^{54}\text{Fe}$  or  $^{56}\text{Fe}$  at its center, has been simulated using TRIPOLI4.7 with both evaluations to highlight this effect. The results are given on figure 3 for a sphere of Fe with  $8.3 \cdot 10^{-2} \text{ atom.cm}^{-1} \text{ barn}^{-1}$  density. This density is quite similar to that of the stainless steel.

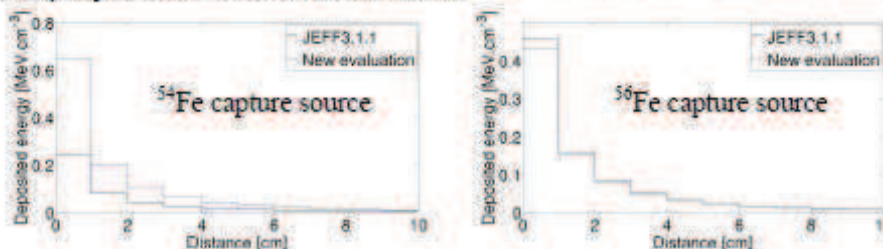


Fig. 3. Local energy deposition of photon in a sphere after a thermal capture at its center

The local energy deposition has strongly increased in the case of  $^{54}\text{Fe}$ . The total energy deposited in the whole sphere is 150% greater with the new evaluations. In the case of  $^{56}\text{Fe}$ , the new spectrum is harder, so the mean free path of the emitted photons is longer. Thus, energy is deposited further with the new evaluation.

The same calculation has been performed with a sphere of stainless steel. The differences from the central to the external shell between the new evaluation and JEFF-3.1.1 range from -0.5% to 3%.

### 3.3. Application on the PERLE experiment interpretation

PERLE [11] is an integral experiment performed in the zero-power reactor EOLE at CEA Cadarache. One of the PERLE purpose is to estimate the local gamma heating in a heavy reflector for the 3<sup>rd</sup> generation reactors. It is a regular PWR-type core, with 3.7% enriched  $\text{UO}_2$  pins in a 1.32cm square pitch, surrounded by a 22cm-thick stainless steel reflector. A variety of TLDs have been inserted across the reflector to measure the gamma KERMA.

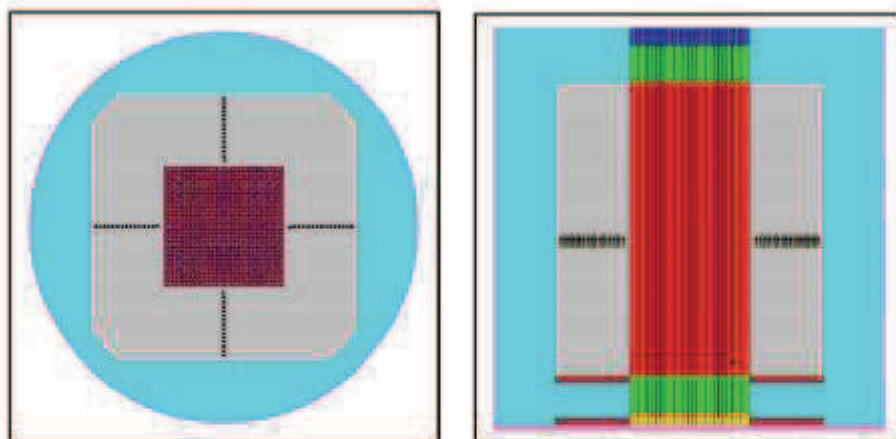


Fig. 4. The PERLE core simulated by TRIPOLI4.7

Previous interpretations of the measurements have shown that the calculated gamma dose in the reflector is slightly underestimated by  $-7 \pm 6\%$  ( $1\sigma$ ) when performed with the JEFF-3.1.1 library. The new evaluations allow us to improve this result by 1 to 2%. The difference between the two evaluations is given on table 1.

Table 1. Difference between JEFF3.1.1 and the new evaluations on the calculated local-deposited dose in the reflector of the PERLE experiment

Penetration in the SS reflector [cm]	Differences with JEFF3.1.1 [%]
3.08	0.9
5.94	1.3
8.58	1.5
11.19	1.5
13.84	2.3
16.38	2.3

#### 4. CONCLUSION AND PERSPECTIVES

The photon production knowledge is becoming a very important issue. The JEFF3.1.1 library which is very efficient for the neutron transport calculation [12] [13], needs improvements for this new problematic. Thus, new gamma production spectra have been produced mixing discrete gamma peak available in the latest EGAF measurements and a theoretical calculation using the modeling code TALYS. 16 new evaluations are proposed for the next JEFF-3.2 library.

These new evaluations are energetically coherent. They account for more discrete gamma peaks, especially the high-energy-primary-gamma rays, and describe them more accurately than before.

Few tests made with the TRIPOLI code on the iron isotopes have shown that the impact of the new evaluation on the local energy deposition is not negligible. On a stainless steel sphere, this difference can locally be higher than 3%.

An application has been performed on the PERLE experiment, showing an improvement of the new evaluations on the dose calculation in a stainless steel reflector.

#### ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge Dr Arjan Koning from NRG for his help in TALYS using. The authors also thank EDF and Areva NP for their financial support.

#### REFERENCES

1. C. Döderlein, *Conf. PHYSOR2008*, (Switzerland, 2008)
2. A. Santamarina, JEFF Report 22, OECD, (2009)
3. "ENDF-6 Formats Manual", CSEWG Document ENDF-102, *Report BNL-90365-2009* Rev. 1, <http://www.nndc.bnl.gov/csewg/docs/endl-manual.pdf> (2009).
4. [http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/Pub1263\\_web.pdf](http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/Pub1263_web.pdf), IAEA, (Vienna, 2007).
5. Jag Tuli, <http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/>.
6. A. J. Koning et al., <http://www.talys.eu/fileadmin/talys/user/docs/talys1.2.pdf>, (2009).
7. J. Kopecky, M. Uhl, *Phys. Rev. C*, Vol. 41, Num. 5, pp. 1941-1955 (1990).
8. *IAEA-TECDOC-1506*, <http://www-nds.iaea.org/ripl2/handbook/ripl2.pdf> (2006).
9. S. Ravaux et al. *Proc. of PHYTRA 2*, (Fes, Morocco, 2011).
10. E. Brun, *Proc. of ICAPP 2011*, (Nice, 2011).
11. C. Vaglio-Gaudard et al., *Nucl. Sci. and Eng.*, 166, pp. 89-106 (2010).
12. A. Santamarina et al., *Int. Conf. on Fuel Management ANFM-IV*, (Hilton Head Island, USA, 2009).
13. E. Martinoli et al., *Conf. PHYSOR2010*, (Pittsburgh, USA, 2010).



## **Bibliographie**

- [1] Paul Reuss, "Précis de neutronique", Collection génie atomique, EDP science.
- [2] F. Carrel et al., "Measurements of Plutonium in large Concrete Radioactive Waste Packages by Photon Activation", IEEE Trans. Nucl. Sci., Vol. 57, No. 6, December 2010
- [3] A. Santamarina et al., "The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library", JEFF Report 22.
- [4] K. Shibata et al., "JENDL-4.0 : A New Library for Nuclear Science and Engineering", J. Sci. Technol., 48(1), I-30 (2011).
- [5] M. B. Chadwick et al., "ENDF/B-VII.0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Science and Technology", Nucl. Data Sheets, 102, 2931 (2006).
- [6] R. Le Tellier, "Développement de la méthode des caractéristiques pour le calcul de réseau", Thèse de l'école polytechnique de Montréal, Décembre 2006.
- [7] M. Coste-Delcaux, "Formalisme d'autoprotection du code APOLLO2", Rapport CEA-R-6300, Juillet 2012.
- [8] J-P. Both et al., "Introduction au transport de particules par la méthode Monte Carlo", Rapport CEA, SERMA/LEPP/RT/02-3168/A.
- [9] P. Bellier et al., "APOLLO2.5 : notice théorique", Rapport DMT, SERMA/LENT/RT/99-2719/A.
- [10] Projet APOLLO, "APOLLO2 : Manuel de reference de la version 2-8-2", Rapport DM2S, SERMA/LLPR/RT/10-4851/A.
- [11] TRIPOLI4 Project Team, "TRIPOLI-4 Version 7 user guide", Rapport DM2S, SERMA/LTSD/RT/10-4941/A.
- [13] E. Brun, "overview of TRIPOLI-4 Version 7 Continuous-Energy Monte Carlo Code Simulation", Proc. of Int. Conf. ICAPP2011, Nice, May 2-5, 2011.
- [14] A. Tsilanizara et al., "Formulaire DARWIN : Notice de Principe", CEA/DANS/DM2S/SERME/LEPP/RT/05-3772/A.



[15] Y. Penelieu, "Implémentation de la cascade électromagnétique dans le code de transport par la méthode de Monte Carlo TRIPOLI-4", Rapport DM2S, SERMA/LEPP/RT/02-3178/A, 30 décembre 2002.

[16] C. Lemaignan, "Science des matériaux pour le nucléaire", Collection genie atomique, EDP sciences.

[17] J. Lindhart et al., "Notes on atomic collisions", II et III mathematic-fysiske Meddedelser, Kongelige danske Videnskabernes Selskab, 33 n°10 et 14 (1963).

[18] M.J. Norgett et al., "A proposed method of Calculating displacement dose rates", Nucl. Eng. Design. 33, 50 (1975).

[19] M. Salvatores, "La definition des sections efficaces et des taux de déplacements par atome", CEA NT/SPRC/91/001.

[20] A. Alberman "Influence du spectre neutronique sur la fragilisation des aciers de cuves", Rapport technique RT/95-123 (1996), CEA/DRN/DRE/SRO/SEIN.

[21] B. Tanguy, "Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition", Thèse de l'école des mines de Paris (2001).

[22] R. E. MacFarlane et al., "The NJOY Nuclear Data System Version 91", LA-12740-M (October 1994).

[23] D. E. Cullen, "EPDL97 : the Evaluated Photon Data Library, '97 Version", UCRL-50400, Vol. 6, Rev. 5 (1997).

[24] ENDL Type Formats for the Livermore Evaluated Photon Data Library, EPDL.

[25] L. Kissel, "The Validity of Form-Factor, Modified-Form-Factor and Anomalous-Scattering-Factor Approximations in Elastic Scattering Calculations", Acta Cryst., A51, 271-288 (1995).

[26] D. E. Cullen, "A simple model of photon transport", Nucl. Instru. Methods, B101, 499-510 (1995).

[27] P. M. Bergstrom et al., "An overview of the theories used in Compton Scattering Calculations", Radiat. Phys. Chem., Vol. 50, N°. 1, pp. 3-29 (1997).

[28] J. H. Hubell, "Summary of Existing Information on the incoherent Scattering of Photons, Particularly on the Validity of the Use of the Incoherent Scattering Function", *Radiat. Phys. Chem.*, Vol.50, N°. 1, pp. 113-124 (1997).

[29] S. Manninen, "Resonant Raman Scattering and Fluorescence Spectroscopy", *Radiat. Phys. Chem.* Vol. 50, N°. 1, pp. 77-89 (1997)

[30] P. Kessler, "Contribution de la partie imaginaire de l'amplitude de l'effet Delbruck à la Diffusion élastique des photons", *J. Phys. Radium*, Tome 19, Page 739 (1958).

[31] J. H. Hubbel, "Photon Mass Attenuation and Energy-absorption Coefficients from 1 keV to 20 MeV", *Int. J. Appl. Radiat. Isot.*, Vol. 33, p1269-1290 (1982).

[32] H. Métivier, "Radioprotection et ingénierie nucléaire", Collection Génie Atomique, EDP Sciences.

[33] ENDL Type Formats for the Livermore Evaluated Electron Data Library, EEDL.

[34] L. Pages et al., "Pertes d'énergie, Parcours et rendement de freinage pour les électrons de 10 keV à 100 MeV dans les éléments simples et quelques composés chimiques", *Rapport CEA – R 3942* (1970).

[35] S. Ravaux, D. Bernard, "La production  $\gamma$  en réacteur, Analyse critique des données évaluées dans les bibliothèques JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII et JENDL4.0", Document Technique DEN, SPRC/LEPh/11-218 (2011).

[36] A. Lüthi, "Development and Validation of Gamma heating calculational methods for plutonium-burning fast reactors", Thèse n°1854, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne (1998).

[37] Cross section evaluation working group, "ENDF-102 ENDF-6 data formats and procedures for the evaluated nuclear data files ENDF-VII", BNL-NCS-44945-01/04-Rev, Informal Report, Revised June 2005.

[38] R. B. Day, M. Walt, "Gamma Rays from Neutron Inelastic Scattering in  $^{10}\text{B}$ ,  $^{19}\text{F}$  and  $^{56}\text{Fe}$ ", *Phys. Rev.*, Volume 117, Number 5, March 1, 1960.

[39] S. Mengelle, "Notice d'identification des bibliothèques CEA v5.1 pour APOLLO2", CEA/DEN/DANS/DM2S/SERMA/LLPR/RT/11-5149/A, 28/6/2011.

[40] C. Jouanne, "Small corrections on JEFF-3.1.1 evaluation", JEF/DOC-1362, JEFF meeting, 12/1/2010.

[41] R. W. Peele and F. C. Maienschein, "Spectrum of Photons Emitted in Coincidence with Fission of  $^{235}\text{U}$  by Thermal Neutrons", *Phys. Rev. C*, Volume 3, Number 1, January 1971.

- [42] F. Pleasonton, R. L. Fergusson, H. W. Schmitt, "Prompt Gamma Rays Emitted in the Thermal-Neutron-Induced Fission of  $^{235}\text{U}$ ", Phys. Rev. C, Volume 6, Number 3, September 1972.
- [43] V. V. Verbinsky, H. Weber, R. E. Sund, Prompt Gamma Rays from  $^{235}\text{U}(\text{n}, \text{f})$ ,  $^{239}\text{Pu}(\text{n}, \text{f})$ , and Spontaneous Fission of  $^{252}\text{Cf}$ , Phys. Rev. C, Volume 7, Number 3, March 1973.
- [44] F. Pleasonton, "Prompt g-Rays Emitted in the Thermal-Neutron Induced Fission of  $^{233}\text{U}$  and  $^{239}\text{Pu}$ ", Nucl. Phys. A213 (1973) 413-425.
- [45] S. Oberstedt, "Correlation measurements of fission-fragments properties", EFNUDAT, Measurements and Models of Nuclear Reactions, Paris, 25-27 May 2010.
- [46] E. Kwan et al., "Prompt energy distribution of  $^{235}\text{U}(\text{n}, \text{f})\gamma$  at bombarding energies of 1 – 20 MeV", Nucl. Instr. Methods A, Vol. 688, pp. 55-61, October 2012.
- [47] O. Litaize, O. Sérot, "Investigation of phenomenological models for the Monte Carlo simulation of the prompt fission neutron and  $\gamma$  emission", Phys. Rev. C 82, 054616, 2010.
- [48] L. Stewart, R. E. Hunter, "Evaluated Neutron-Induced Gamma-Ray Production Cross Sections for  $^{235}\text{U}$  and  $^{238}\text{U}$ ", LA-4918 UC-34, July 1972.
- [49] C. L. Dunford, "ENDF Utility Codes Release 7.0", October 26, 2004.
- [50] D. G. Madland, « Total prompt energy release in the neutron-induced fission of  $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ , and  $^{239}\text{Pu}$  », Nucl. Phys. A 772, pp. 113-137 (2006).
- [51] J-C. Benoit, "Développement d'un code de propagation des incertitudes des données nucléaires sur la puissance résiduelle dans les réacteurs à neutrons rapides", Thèse, Université Paris Sud, 534 MIPEGE (2012).
- [52] J. C. Hardi et al., "The essential decay of Pandemonium : A demonstration of errors in complex beta-decay schemes", Phys. Let. B, Vol 71, Issue2, 307-310, November 1977.
- [53] G. Audi, A. H. Wapstra, "The 1995 update to the atomic mass atomic", Nucl. Phys. A 595, 409 (1995).
- [54] C. Dean, "Addition of gamma emission spectra for fission products", JEF/DOC-1387.
- [55] J. K. Tuli, "Evaluated Nuclear Structure Data File, A manual for preparation of data set", BNL-NCS-51655-01/02-Rev.
- [56] "Database of prompt gamma rays from slow neutron capture for elemental analysis", IAEA, Vienna (2007).
- [57] L. V. Groshev et al., " $\gamma$ -ray spectra from the radiation of neutrons for even-even radiating nuclei with rotational levels" (1957).
- [58] R. Vennink et al., "Investigation on the  $^{56}\text{Fe}(\text{n}, \gamma)^{57}\text{Fe}$  and  $^{57}\text{Fe}(\text{n}, \gamma)^{58}\text{Fe}$  reactions", Nucl. Phys., A334, pp. 421-445 (1980).

- [59] W. Hauser, H. Feshbach, "The inelastic scattering of neutrons", Phys. Rev., Vol. 87, Num. 2 (1952).
- [60] A. J. Koning et al., "TALYS-1.2, A nuclear reaction program" (2009).
- [61] G. Boutoux, "Sections efficaces neutroniques via la méthode de substitution", Thèse de l'université de Bordeaux, C.E.N.B.G. (CNRS – IN<sup>2</sup>P<sup>3</sup> – UMR 5797).
- [62] R. Capote et al., "RIPL – Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations", Nuclear Data sheets 110 (2009).
- [63] J. Kopecky, M. Uhl, R. E. Chrien, "Radiative strength in the compound nucleus <sup>157</sup>Gd", Phys. Rev. C, Vol. 47, N°. 1 (1993).
- [64] P. Chomaz, "Collective excitation in nuclei", Ecole Joliot Curie (1997)
- [65] H. Herman et al., "EMPIRE : Nuclear Reaction Model Code System for Data Evaluation", Nuclear Data Sheet 108 (2007).
- [66] P. G. Young et al., "Comprehensive Nuclear Model Calculations : Introduction to the Theory and Use of the GNASH Code", Los Alamos.
- [67] O. Iwamoto, "Development of a Comprehensive Code for Nuclear Data Evaluation, CCONE, and Validation Using Neutron-Induced Cross Section for Uranium Isotopes", J. Nucl. Sci. Tech., Vol. 44, N°. 5, pp. 687-697 (2007).
- [68] F. Gunsing et al., "The simulation of gamma spectra of <sup>113</sup>Cd(n,γ) for neutron resonance spin assignment", Nucl. Instr. Meth., A365 (1995).
- [69] O. Litaize, O. Serot, "Investigation of phenomenological models for the Monte Carlo simulation of the prompt fission neutron and γ emission", Phys. Rev., C82 (2010).
- [70] S. Ravaux et al., "New evaluation of photon production for JEFF3", proc. of PHYTRA2, the 2<sup>nd</sup> Int. Conf. on Physics and Technology of Reactors and Applications, Rabat (2011).
- [71] S. Ravaux et al., "New evaluation of photon production for JEFF-3", proc. of WONDER 2012, the 3<sup>rd</sup> Int. Workshop on Nuclear Data Evaluation for Reactor Application, Aix en Provence (2012).
- [72] R. E. Chrien, "Gamma Rays Following Resonant Neutron Capture in <sup>56</sup>Fe", Phys. Rev. C, Vol. 1, N°. 3 (1970).

[73] S. Ravaux, “ New Talys generated photon production spectrum with the latest EGAF measurements ”, JEF/DOC-1390, NEA offices (May 2011).

[74] S. Ravaux, “ New gamma emission spectra from neutron radiative capture”, JEF/DOC-1404, NEA offices (December 2011).

[75] B. Baramsai, “Neutron Capture Reactions on Gadolinium Isotopes”, Physics, Raleigh NC (2010).

[76] J-F. Vidal et al., “Interprétation de l’expérience PERLE pour la qualification du calcul APOLLO2.8/CEAv4.1 du réflecteur acier de l’EPR”, Document technique den, SPRC/LEPh/09-228.

[77] C. Vaglio-Gaudard, “Interpretation of PERLE Experiment for the validation of Iron Nuclear Data Using Monte Carlo Calculations”, Nucl. Sci. Eng, 166, pp. 89 – 106 (2010).

[78] C. Vaglio-Gaudard, “Validation de données nucléaires du fer pour le calcul neutronique des réacteurs nucléaires”, Thèse de l’université de Grenoble, I-MEP2 (2010).

[79] D. Blanchet, “Développements méthodologiques et qualification de schéma de calcul pour la modélisation des échauffements photoniques dans les dispositifs expérimentaux du futur réacteur d’irradiation technologique Jules Horowitz (RJH) ”, Thèse de l’université Blaise Pascal de Clermont-Ferrand, EDSF (2006).

[80] G. Sengler, “EPR core design”, Nucl. Eng. Des., 187, pp 79 – 119 (1999).

[81] A. Dos Santos, “Heavy reflector experiment in the IPEN/MB-01 reactor”, Int. Conf on the physics of Reactors, Switzerland (2008).

[82] Y. S. Horowitz, “The theoretical and microdosimetric basis of thermoluminescence and applications to dosimetry”, Phys. Med. Biol., Vol. 26, N°. 4, pp. 765 – 824 (1981).

[83] J. T. Randall M. H. F. Wilkins, “The phosphorescence of various solids”, Proc. R. Soc. London., A, p625 – 661 (1945).

[84] L. Benmansour, “Gamma heating experimental results of the ITER prototypical blanket shield experiment at FNG and their analyses”, Note technique NT/SPEX/LPE/03-005.

[85] B. G. Oltman et al., “Spectral analyses of thermoluminescent curves”, Proc. 2<sup>nd</sup> Int. Symp. On Luminescence Dosimetry, USAEC, CONF-680920, 623-631 (1968)

[86] ] L. Katz and S. Penfold, "Range-Energy Relations for Electrons and the Beta-Ray End-Point Energies by Absorption, Rev. Mod. Phys., Vol. 24, N°. 1, pp 28 – 44 (1952).

[87] S. Ravaux, D. Bernard, " Interprétation des mesures d'échauffements par détecteurs thermoluminescents (TLD) dans l'expérience PERLE HOMOGENE avec le code TRIPOLI4.9 et la bibliothèque JEFF3.1.1 ", Note technique DEN, SPRC/LEPh/12-214 (2012).

[88] M. J. Berger et al., "XCOM : Photon production Database", NBSIR 87-3597, NIST, PML, radiation and Biomolecular division.

[89] A. Mazzolo, "Calculs de reprise surfacique dans le code de transport MONTE CARLO TRIPOLI-4", Rapport DM2S, SERMA/LTSD/RT/08-4342/A.

[90] "Standard practice for Application of  $\text{CaF}_2(\text{Mn})$  Thermoluminescence Dosimeters in Mixed Neutron-Photon Environments " , ASTM international, Designation : E2450 – 06.

[91] S. Ravaux, D. Bernard, " Validation et qualification du produit APOLLO2.8-3/CEA2005.V4.1.1 pour le calcul des échauffements photoniques. Interprétation de l'expérience PERLE/TLD ", Document technique DEN, SPRC/LEPh/12-218 (2012).

[92] C. Mounier, S. Mengelle, "Description des données physiques contenues dans les bibliothèques APOLLO2 et de leurs traitement par la chaîne GALILEE V0", RT SERMA/LLPR/RT/09-4774/1.

[93] S. Mengelle, RT SERMA/LLPR/RT/08-4584/A.

[94] S. Mengelle, RT SERMA/LLPR/RT/08-4599/A.

[95] N. Huot, "Eléments de validation de la production de  $\gamma$  prompts par le code APOLLO2 », RT SERMA/TSD/RT/08-4578/A.

[96] C. Vaglio-Gaudard et al., "Monte-Carlo Interpretation of the photon heating measurements in the integral AMMON/REF experiment in the EOLE facility", IEEE Trans. Nucl (à paraître)

[97] H. Amharak et al., "Rapport experimental : étalonnage des détecteurs thermo-luminescents (TLD), SPEX/LPE/11-041 (2011)

[98] L. Bourhrara, "Rappel des bases de la théorie de perturbation en vue d'intégration dans le code Apollo3", RT CSSI/311-1/AB08F023/RAP 1.





## Liste des figures

Figure I-1 Section efficace totale du $^{56}\text{Fe}$	7
Figure I-2 Cylindrisation des cellules combustibles pour le calcul $P_{ij}$	11
Figure II-1 Formation d'une cascade de déplacement à partir d'un $pka$ d'énergie cinétique $T$	19
Figure II-2 Cinétique de recombinaison des défauts ponctuels dans un matériau cristallin	21
Figure III-1 Facteur de forme de la section de diffusion élastique	33
Figure III-2 Partie réelle du facteur de diffusion anormal de la section de diffusion élastique	33
Figure III-3 Partie imaginaire du facteur de diffusion anormal de la section de diffusion élastique	33
Figure III-4 Section efficace microscopique de l'effet photoélectrique	35
Figure III-5 Fonction de diffusion de la section de diffusion inélastique	37
Figure III-6 Illustration de la différence entre le KERMA et la dose photoniques	40
Figure III-7 Représentation du KERMA, de la dose, du flux photonique et de la fluence électronique à l'interface entre deux matériaux	41
Figure III-8 Echauffements photoniques et neutroniques dans les différents matériaux de la maquette critique MASURCA dans la configuration ZONA2B	43
Figure III-9 Energie absolue déposée par les neutrons et les photons dans un cœur avec réflecteur en fonction de l'emplacement	45
Figure III-10 Energie déposée relative à l'énergie totale déposée par les neutrons et les photons dans un cœur avec réflecteur en fonction de l'emplacement	45
Figure III-11 Comparaison de l'énergie déposée dans un réflecteur en acier entre un calcul couplé neutron-photon et un calcul non couplé neutron	46
Figure IV-1 Extrait des données relatives à la fission de $^{235}\text{U}$ dans la bibliothèque JEFF-3.1.1	48
Figure IV-2 La diffusion inélastique discrète dans le modèle du noyau composé	50
Figure IV-3 Spectres d'émission des $\gamma$ prompts de fission de $^{233}\text{U}$ des bibliothèques JEFF-3.1.1 (=ENDF/B-VII) et JENDL-4.0	53
Figure IV-4 Spectres d'émission des $\gamma$ prompts de fission de $^{235}\text{U}$ des bibliothèques JEFF-3.1.1 (=ENDF/B-VII) et JENDL-4.0	53
Figure IV-5 Spectres d'émission des $\gamma$ prompts de fission de $^{238}\text{U}$ des bibliothèques JEFF-3.1.1 (=ENDF/B-VII) et JENDL-4.0	53
Figure IV-6 Spectres d'émission des $\gamma$ prompts de fission du $^{239}\text{Pu}$ des bibliothèques ENDF/B-VII et JENDL-4.0	54
Figure IV-7 Spectres d'émission des $\gamma$ prompts de fission du $^{241}\text{Pu}$ des bibliothèques ENDF/B-VII et JENDL-4.0	54
Figure IV-8 La capture radiative dans le modèle du noyau composé	58
Figure IV-9 Comparaison de l'énergie théorique et de l'énergie $\gamma$ émise selon JEFF-3.1. pour $^{48}\text{Ti}(n, \gamma)$	60
Figure IV-10 Comparaison de l'énergie théorique et de l'énergie $\gamma$ émise selon JEFF-3.1. pour $^{57}\text{Fe}(n, \gamma)$	60
Figure IV-11 Comparaison de l'énergie théorique et de l'énergie $\gamma$ émise selon JEFF-3.1. pour $^{56}\text{Fe}(n, \gamma)$	60
Figure V-1 Spectre d'émission photonique mesuré suite à la capture radiative d'un neutron par une matrice de gadolinium	67
Figure V-2 Rapport de l'énergie disponible dans les spectres de EGAF $Q_\gamma$ sur l'énergie totale disponible par capture radiative $B_n=S_n$	69
Figure V-3 Spectre d'émission de $\gamma$ de capture sur le $^{56}\text{Fe}$	69
Figure V-4 Section d'absorption photonique du $^{208}\text{Pb}$ , $^{120}\text{Sn}$ , $^{65}\text{Cu}$	75
Figure V-5 Spectre continu de capture neutronique du $^{155}\text{Gd}(n_{1\text{ keV}}, \gamma)$ en fonction du nombre de niveaux discrets	78
Figure V-6 Spectres émis suite à la réaction $(n, \gamma)$ avec un neutron thermique et un neutron de 1.15 keV capturé par la première résonance de capture du $^{56}\text{Fe}$	79
Figure V-7 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{54}\text{Fe}$ avec les autres évaluations	80
Figure V-8 Emissions photoniques discrètes du $^{54}\text{Fe}$ contenues dans EGAF et insérées dans les nouvelles évaluations	81
Figure V-9 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{56}\text{Fe}$ avec les autres évaluations	81
Figure V-10 Emissions photoniques discrètes du $^{56}\text{Fe}$ contenues dans EGAF et insérées dans les nouvelles évaluations	82

Figure V-11 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{155}\text{Gd}$ avec les autres évaluations	82
Figure V-12 Emissions photoniques discrètes du $^{155}\text{Gd}$ contenues dans EGAF et insérées dans les nouvelles évaluations	83
Figure V-13 Propagation et dépôt d'énergie de la source de capture dans le $^{54}\text{Fe}$ avec les anciennes et les nouvelles évaluations	84
Figure V-14 Propagation et dépôt d'énergie de la source de capture dans le $^{56}\text{Fe}$ avec les anciennes et les nouvelles évaluations	84
Figure V-15 Propagation et dépôt d'énergie du source de capture dans l'acier avec les anciennes et les nouvelles évaluations	84
Figure VI-1 Sections efficaces d'interaction neutronique de l'hydrogène	87
Figure VI-2 Section efficace neutronique du $^{56}\text{Fe}$	88
Figure VI-3 Photographie du cœur PERLE	89
Figure VI-4 Position des points de mesure dans le cœur PERLE (X)	91
Figure VI-5 Photographie des TLD	92
Figure VI-6 Principe de fonctionnement des détecteurs thermo-luminescents	94
Figure VI-7 Lois de chauffage utilisées pour la lecture des TLD	94
Figure VI-8 Chambre d'ionisation $\gamma$	95
Figure VI-9 Spectre d'émission des principaux pics de thermoluminescence du matériau LiF : Mg, Ti après exposition à différents types de radiations	97
Figure VII-1 Description du volume englobant les piluliers	104
Figure VII-2 Stockage du courant entrant et des sources photons	105
Figure VII-3 Distribution des taux de fission dans le réseau de crayon combustible	107
Figure VII-4 Traverse radiale de taux de fission dans les différentes tranches axiales du combustible	108
Figure VII-5 Evolution du spectre d'émission des $\gamma$ retardés après une fission	109
Figure VII-6 Energie cumulée émise par les produits de fission en fonction du temps après une fission	110
Figure VII-7 Spectre moyen émis par fission par les $\gamma$ retardés dans l'expérience PERLE	111
Figure VII-8 Comparaison des spectres $\gamma$ prompts émis par l' $^{238}\text{U}$ , par l' $^{235}\text{U}$ et du spectre $\gamma$ retardé émis par l' $^{235}\text{U}$ normalisé à une fission par seconde	112
Figure VII-9 Sensibilité de la réponse des TLD CaF2 aux neutrons rapides et épithermiques	113
Figure VII-10 Doses relatives mesurées et calculées dans les TLD CaF2 épais	118
Figure VII-11 Doses relatives mesurées et calculées dans les TLD CaF2 épais dans le réflecteur	118
Figure VII-12 Doses relatives mesurées et calculées dans les TLD CaF2 fin	119
Figure VII-13 Doses relatives mesurées et calculées dans les TLD CaF2 fin dans le réflecteur	119
Figure VII-14 Représentation de la géométrie simplifiée	121
Figure VII-15 Comparaison des flux photoniques autour des TLD en position R2 dans les géométries cœur complet et simplifiée	122
Figure VII-16 Comparaison des flux photoniques autour des TLD en position R14 dans les géométries cœur complet et simplifiée	123
Figure VII-17 Courant de photons autour des piluliers situés dans la zone fissile	125
Figure VII-18 Courant de photons autour des piluliers situés dans le réflecteur	125
Figure VII-19 Production de photon dans les piluliers situés dans le réflecteur	126
Figure VII-20 Dose déposée par les neutrons et les photons dans le combustible (trait plein) et l'acier (trait pointillé) dans l'expérience PERLE	133
Figure VII-21 Dose relative à la dose totale déposée dans le combustible de la zone fissile et dans l'acier du réflecteur	133
Figure VII-22 Dose relative à la dose totale déposée dans l'acier de la zone fissile et dans l'acier du réflecteur	133
Figure VII-23 Taux de réaction neutronique dans le réflecteur de l'expérience PERLE	134
Figure VIII-1 Flux photonique de pondération pour la définition des sections efficaces multigroupes de transport photonique	141
Figure VIII-2 Sections photoatomiques ponctuelles et mises en groupes de l'uranium	142
Figure VIII-3 Niveau de flux neutronique dans le combustible calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ]	148
Figure VIII-4 Différences des niveaux de flux neutroniques dans le combustible entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]	149
Figure VIII-5 Comparaison des spectres de flux neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 dans le crayon central de la zone fissile (position 14-14)	149
Figure VIII-6 Comparaison des spectres de flux neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 dans le crayon situé dans le coin de la zone fissile (position 27-27)	150
Figure VIII-7 Découpage spatial du réflecteur de PERLE pour la validation APOLLO2	151

Figure VIII-8 Niveau de flux neutronique dans le réflecteur calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ]	151
Figure VIII-9 Différences des niveaux de flux neutroniques dans le réflecteur entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]	152
Figure VIII-10 Niveau de flux neutronique sur la traverse centrale du réflecteur [ $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ]	152
Figure VIII-11 Comparaison des spectres de flux neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 dans le réflecteur à une profondeur de 0.66 cm	153
Figure VIII-12 Comparaison des spectres de flux neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 dans le réflecteur à une profondeur de 13.84 cm	153
Figure VIII-13 Comparaison des spectres de flux neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 dans le réflecteur à une profondeur de 20.46cm	154
Figure VIII-14 Différence cumulée entre les spectres neutroniques calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 à une profondeur de 13.84 cm ( $\sum_0^E (A2(E) - T4(E)) / \sum_0^{E_{\max}} T4(E) [\%]$ )	154
Figure VIII-15 Différence sur la multiplicité des sources gamma calculées avec APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]	155
Figure VIII-16 Spectre de production photonique à une profondeur de pénétration de 13.84 cm sur l'axe central du réflecteur	155
Figure VIII-17 Différence cumulée entre les spectres de production photonique calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 à une profondeur de 13.84 cm ( $\sum_0^E (A2(E) - T4(E)) / \sum_0^{E_{\max}} T4(E) [\%]$ )	156
Figure VIII-18 Niveau de flux photonique dans chaque crayon calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ]	156
Figure VIII-19 KERMA photon total dans chaque crayon calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{MeV}.\text{g}^{-1}.\text{s}^{-1}$ ]	157
Figure VIII-20 Différences des KERMA $\gamma$ totaux dans le combustible entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]	157
Figure VIII-21 Niveau de flux photonique dans le réflecteur calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ]	158
Figure VIII-22 KERMA photon total dans le réflecteur calculé avec TRIPOLI4 [ $\text{MeV}.\text{g}^{-1}.\text{s}^{-1}$ ]	158
Figure VIII-23 Proportion cumulée de KERMA déposé sur la traverse centrale du réflecteur	159
Figure VIII-24 Différences des KERMA $\gamma$ totaux dans le combustible entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]	159
Figure VIII-25 KERMA $\gamma$ total sur la traverse centrale du réflecteur	160
Figure VIII-26 Différences des KERMA $\gamma$ totaux avec la composante retardée dans le combustible entre les calculs APOLLO2 et TRIPOLI4 (A2/T4-1) [%]	161
Figure VIII-27 Coupe axiale du cœur PERLE	164
Figure VIII-28 Coefficients de passage 3D/2D sur les KERMA $\gamma$ prompts calculés avec TRIPOLI4 (T4_2D/T4_3D)	165
Figure B-1 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{57}\text{Fe}$ avec les autres évaluations	183
Figure B-2 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{58}\text{Fe}$ avec les autres évaluations	183
Figure B-3 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{107}\text{Ag}$ avec les autres évaluations	184
Figure B-4 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{109}\text{Ag}$ avec les autres évaluations	184
Figure B-5 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{113}\text{Cd}$ avec les autres évaluations	184
Figure B-6 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{113}\text{In}$ avec les autres évaluations	185
Figure B-7 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{115}\text{In}$ avec les autres évaluations	185
Figure B-8 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{174}\text{Hf}$ avec les autres évaluations	185
Figure B-9 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{177}\text{Hf}$ avec les autres évaluations	186
Figure B-10 Comparaison des nouveaux spectres de production de $\gamma$ de capture radiative du $^{178}\text{Hf}$ avec les autres évaluations	186

<i>Figure B-11 Comparaison des nouveaux spectres de production de <math>\gamma</math> de capture radiative du <math>^{179}\text{Hf}</math> avec les autres évaluations</i>	186
<i>Figure B-12 Comparaison des nouveaux spectres de production de <math>\gamma</math> de capture radiative du <math>^{180}\text{Hf}</math> avec les autres évaluations</i>	187
<i>Figure B-13 Comparaison des nouveaux spectres de production de <math>\gamma</math> de capture radiative du <math>^{157}\text{Gd}</math> avec les autres évaluations</i>	187
<i>Figure D-1 Différence sur les niveaux de flux photoniques dans le réflecteur de PERLE pour deux calculs APOLLO2 en P0 et P5 (<math>A2\_P0/A2\_P5-1</math>) [%]</i>	193
<i>Figure D-2 Différence sur les niveaux de flux photoniques dans le réflecteur de PERLE pour deux calculs APOLLO2 en P0c et P5 (<math>A2\_P0c/A2\_P5-1</math>) [%]</i>	193
<i>Figure D-3 Différence sur les niveaux de flux photoniques dans le réflecteur de PERLE pour deux calculs APOLLO2 en P1 et P5 (<math>A2\_P1/A2\_P5-1</math>) [%]</i>	194
<i>Figure D-4 Différence sur les niveaux de flux photoniques dans le réflecteur de PERLE pour deux calculs APOLLO2 en P1 et P5 (<math>A2\_P3/A2\_P5-1</math>) [%]</i>	194

## Liste des tableaux

Tableau 1 Energie déposée dans les différents matériaux d'une cellule d'un réseau de crayon combustible	44
Tableau IV-1 Résumé des différentes mesures de spectres de $\gamma$ prompts de fission	52
Tableau IV-2 Comparaison des données JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII.0 et JENDL-4.0 relatives aux énergies $\gamma$ de fission	55
Tableau IV-3 Liste des principaux produits de fission avec des spectres $\gamma$ de désintégration manquants	57
Tableau IV-4 Taux de réaction dans un crayon combustible enrichi à 4.5% pour un burn-up de 35 GWj/t	61
Tableau IV-5 Comparaison des taux de réaction dans l'acier	62
Tableau IV-6 Comparaison des taux de réactions dans le combustible	62
Tableau IV-7 Ordre de grandeur de l'énergie photon émise dans le combustible et dans le réflecteur	63
Tableau IV-8 Taux de réactions neutroniques sur les noyaux composants le réflecteur en acier	64
Tableau VII-1 Libre parcours moyen des photons pour différentes énergies dans différents matériaux du cœur PERLE	102
Tableau VII-2 Probabilité d'interaction des photons dans les TLD en fonction de leurs parcours	103
Tableau VII-3 Production photonique des principaux produits d'activation	106
Tableau VII-4 Estimation de la part de l'énergie $\gamma$ totale émise par chaque source dans la partie combustible du cœur PERLE pour une durée d'irradiation de 10 minutes	111
Tableau VII-5 Calcul de la contribution de chaque composante à la dose intégrée par les TLD CaF2 épais	114
Tableau VII-6 Incertitude de calcul sur la dose intégrée par les TLD CaF2 épais	115
Tableau VII-7 Calcul de la contribution de chaque composante à la dose intégrée par les TLD CaF2 fin	115
Tableau VII-8 Incertitude de calcul sur la dose absolue intégrée par les TLD CaF2 fin	116
Tableau VII-9 Doses relatives calculées au centre cœur pour les TLD CaF2 fin et épais dans la configuration « PERLE homogène »	117
Tableau VII-10 Doses relatives au centre cœur mesurées pour les TLD CaF2 fin et épais	117
Tableau VII-11 Ecart calcul-mesure sur la dose mesurée par les TLD de type CaF2	119
Tableau VII-12 Corrélation entre les spectres de flux photonique calculé dans la géométrie simplifiée et dans la géométrie cœur complet pour différents volumes autour des points de mesure	121
Tableau VII-13 Ecart calcul-mesure sur la dose relative déposée dans les TLD de type CaF2 avec la méthode du calcul en deux étapes avec géométrie simplifiée	124
Tableau VII-14 Calcul de la contribution de chaque composante à la dose intégrée par les TLD CaF2 épais	127
Tableau VII-15 Incertitude de calcul sur la dose absolue intégrée par les TLD CaF2 épais	128
Tableau VII-16 Calcul de la contribution de chaque composante à la dose intégrée par les TLD CaF2 fin	128
Tableau VII-17 Incertitude de calcul sur la dose absolue intégrée par les TLD CaF2 fin	129
Tableau VII-18 Dose relative au centre cœur calculée pour les TLD de type CaF2 dans la configuration « PERLE trou d'eau »	130
Tableau VII-19 Doses relatives au centre cœur mesurées pour les TLD CaF2 fin et épais	130
Tableau VII-20 Ecart calcul-mesure sur la dose relative mesurée par les TLD de type CaF2	131
Tableau VII-21 Energie déposée par les photons prompts et retardés ainsi que les neutrons dans le combustible et l'acier dans la configuration « PERLE homogène »	132
Tableau VII-22 Energie déposée par les photons prompts et retardés ainsi que les neutrons dans le combustible et l'acier dans la configuration « PERLE homogène »	135
Tableau VII-23 Comparaison des doses promptes calculées dans les deux configurations du programme expérimental PERLE	136
Tableau VII-24 Comparaison des calculs d'énergie déposée par les photons prompts avec les évaluations du fer dans la bibliothèque JEFF-3.1.1 et les nouvelles évaluations	137
Tableau VIII-1 Coefficients de corrélation des grandeurs photoniques	144
Tableau VIII-2 Coefficients directeurs de la droite de régression linéaire	144
Tableau VIII-3 Multiplicités des sources photons calculées avec APOLLO2 et TRIPOLI4	145
Tableau VIII-4 Niveaux de flux calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4	145
Tableau VIII-5 KERMA total calculé avec APOLLO2 et TRIPOLI4	145
Tableau VIII-6 Coefficients de corrélation des réponses photonique à sources multigroupes identiques	146
Tableau VIII-7 Coefficients directeurs de la droite de régression linéaire à sources multigroupes identiques	146
Tableau VIII-8 Niveaux de flux calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4 à sources multigroupes identiques	147
Tableau VIII-9 KERMA calculé avec APOLLO2 et TRIPOLI4 à sources multigroupes identiques	147
Tableau VIII-10 $k_{\text{eff}}$ calculés avec APOLLO2 et TRIPOLI4	148
Tableau VIII-11 Benchmarking de l'expérience PERLE	162
Tableau VIII-12 KERMA- $\gamma$ (transport np) « expérimentaux » PERLE en 3D	163
Tableau VIII-13 Facteur de passage 3D avec photon retardé $\rightarrow$ 2D avec photon retardé	165



Tableau VIII-14 Qualification des sources et du transport photonique d'APOLLO2	166
Tableau VIII-15 Facteur de passage $\text{prompt} + \text{retardé} \rightarrow \text{prompt}$	167
Tableau VIII-16 Qualification du KERMA prompt d'APOLLO2	167
Tableau A-1 Etat des lieux des sources de $\gamma$ de diffusion inélastique du neutron dans la bibliothèque JEFF-3.1.1	175
Tableau A-2 des lieux des sources de $\gamma$ de capture du neutron dans la bibliothèque JEFF-3.1.1	178
Tableau A-3 Comparaison des chaleurs de capture radiative tabulées dans JEFF-3.1.1 et calculées à partir des masses tabulées dans AME03	181







